

6) 199 22 580.7



19 BUNDESREPUBLIK
DEUTSCHLAND



DEUTSCHES
PATENTAMT

12 Offenlegungsschrift
10 DE 44 33 336 A 1

51 Int. Cl. 6:
G 01 N 21/61
G 01 J 1/16
G 01 J 5/10

21 Aktenzeichen: P 44 33 336.6
22 Anmeldetag: 19. 9. 94
43 Offenlegungstag: 12. 10. 95

Corresp. US 5,464,983

*Nesmy Ableitung bei
konstanter Lichtstärke*

Viel populär!

DE 44 33 336 A 1

30 Unionspriorität: 32 33 31
05.04.94 US 222825

71 Anmelder:
Industrial Scientific Corp., Oakdale, Pa., US

74 Vertreter:
W. Kraus und Kollegen, 80539 München

72 Erfinder:
Wang, Annie Q., Pittsburgh, Pa., US

54 Verfahren und Einrichtung zum Bestimmen der Konzentration einer Substanz, vorzugsweise eines Fluids, besonders bevorzugt eines Gases

57 Die Erfindung betrifft ein Verfahren und eine Einrichtung zum Bestimmen der Konzentration einer Substanz, wie eines Festkörpers, eines Fluids bzw. einer Flüssigkeit oder eines Gases, unter Verwendung von nichtdispersiver Infrarotabsorption. Das Verfahren umfaßt das Messen des Ausgangssignals für eine Mehrzahl von augenblicklichen Zeitdauern; das Berechnen der Änderung (CS) des Ausgangssignals, das Berechnen der Änderung der Änderung (CCS) des Ausgangssignals, wodurch ein Muster von CCS-Daten erzeugt wird; und das Vergleichen der CCS-Daten mit entsprechenden CCS-Daten für eine bekannte Bezugssubstanz, wie einen bekannten Festkörper, ein bekanntes Fluid bzw. eine bekannte Flüssigkeit oder ein bekanntes Gas, bei einer oder mehreren bekannten Konzentrationen und in einem Bereich von bekannten Temperaturen. Die Einrichtung zum Bestimmen der Konzentration an einer bekannten Substanz in einer Probensubstanz, beispielsweise eines bekannten Gases in einer Probengasmischung, umfaßt einen Probensubstanz-aufnehmer, beispielsweise eine Probenkammer; eine Lichtquelle; einen Detektor; einen Signalumwandler; und eine Datenerfassungs- und Mikroprozessoreinheit, welche das Ausgangssignal mißt bzw. erfaßt und einen Speicher mit einem Programm zur Berechnung der Änderung (CS) des Signals und der Änderung der Änderung (CCS) des Signals hat, und welche die von der Probensubstanz, beispielsweise von der Gasprobenmischung, erzeugten CCS-Daten mit CCS-Daten von bekannten Probensubstanzen, ...

DE 44 33 336 A 1

Die folgenden Angaben sind den vom Anmelder ingereichten Unterlagen entnommen

BUNDESDRUCKEREI 08. 95 508 041/341

26/31

Beschreibung

Die Erfindung betrifft ein Verfahren und eine Einrichtung zum Bestimmen der Konzentration einer bekannten Substanz, vorzugsweise eines bekannten Fluids, besonders bevorzugt eines bekannten Gases. Die Erfindung benutzt die nichtdispersive Infrarotabsorption und stellt ein darauf basierendes Verfahren und eine darauf basierende Einrichtung zur Verfügung, welches bzw. welche gegenüber einer Änderung in der Umgebungstemperatur unempfindlich ist.

Es sei zunächst das durch die Erfindung zu lösende Problem näher erläutert:

Die nichtdispersive Infrarotabsorption (die nachstehend auch abgekürzt als NDIR bezeichnet wird) wird als eines der besten Verfahren zur Bestimmung der Konzentration eines Gases angesehen, weil das Verfahren in tragbaren Gasanalysatoren verwendet werden kann. Alle Chemikalien bzw. molekularen Substanzen haben Bindungen, die Molekularvibrations- bzw. -schwingungsenergie enthalten, welche einem spezifischen Wellenlängenabsorptionsspektrum entspricht. Wenn man Energie auf eine Chemikalie bzw. molekulare Substanz einwirken läßt, wird diejenige Energie, die eine Wellenlänge hat, welche für das Wellenlängenabsorptionsspektrum der Chemikalie bzw. molekularen Substanz spezifisch ist, absorbiert. Im vorliegenden speziellen Fall eines Gases, anhand dessen das der Erfindung zugrundeliegende Problem erläutert wird, wird Energie in der Form von Infrarotstrahlung auf ein Gas angewandt. Wenn die Infrarotstrahlung in ein spezielles Gas eingestrahlt wird, wird diejenige Infrarotstrahlung, die eine für das Wellenlängenabsorptionsspektrum des speziellen Gases spezifische Wellenlänge hat, von dem Gas absorbiert. Ein NDIR-Gasanalysator umfaßt typischerweise eine Infrarotquelle, wie beispielsweise eine Glühlampe, sowie eine Kammer zur Aufnahme eines Probengases, und einen Detektor, der ein optisches Bandpaßfilter hat.

Im Betrieb eines NDIR-Gasanalysators wird die Gasprobenmischung in die Kammer eingeleitet, und es wird Licht durch die Kammer hindurchgeschickt. Das optische Bandpaßfilter ermöglicht es nur solchem Infrarotlicht, das Wellenlängen hat, welche für das Absorptionsspektrum des zu detektierenden Gases spezifisch sind, zu dem Detektor zu gelangen. Demgemäß detektiert der Detektor nur solches Licht, das eine in dem Wellenlängenabsorptionsspektrum des detektierten Gases liegende Wellenlänge hat. Wenn der Detektor Licht detektiert, erzeugt er ein elektrisches Signal. Dieses Signal wird einer elektronischen Schaltung zugeführt, die das Signal derart umsetzt, daß das Signal der Konzentration des detektierten Gases umgekehrt proportional ist.

Je größer nämlich die Konzentration des Gases ist, umso größer ist die Absorption des Lichts. Je größer die Absorption des Lichts ist, umso geringer ist die Menge an Licht, die von dem Detektor detektiert wird. Je geringer die Menge an detektiertem Licht ist, umso niedriger ist das von dem Detektor erhaltene Ausgangssignal. Daher ist die Menge an Infrarotlicht, die absorbiert wird, der Konzentration des Gases direkt proportional, und die Konzentration des detektierten Gases ist demgemäß der Größe des Ausgangssignals, das von dem Detektor erhalten wird, umgekehrt proportional.

Der Detektor ist gewöhnlich ein wärmeempfindlicher Detektor, wie beispielsweise eine Thermosäule. Da die meisten Infrarotdetektoren temperaturempfindlich sind, reagieren sie nicht nur auf das Infrarotlicht in der Kammer, sondern auch auf Änderungen in der Umgebungstemperatur. Wenn ein Gasanalysator in einer Umgebung verwendet wird, deren Temperatur nicht stabil ist, insbesondere im Freien, in Bergwerken, in Werkshallen u. dgl., wie das bei tragbaren Gasanalysatoren häufig geschieht, dann können die dort auftretenden Umgebungstemperaturänderungen die Empfindlichkeit, Stabilität und Zuverlässigkeit, insbesondere die Meßgenauigkeit, des Gasanalysators beim Bestimmen von Gaskonzentrationen signifikant beeinträchtigen.

Die Fig. 1 veranschaulicht die Wirkung von Umgebungstemperaturänderungen auf einen konventionellen NDIR-Gasanalysator, der zum Bestimmen der Konzentration eines Gases verwendet wird. Bei der Aufnahme der Kurve der Fig. 1 wurde reine Luft in die Probengaskammer eines konventionellen Gasanalysators eingeleitet. Das in dem konventionellen Gasanalysator vorgesehene optische Bandpaßfilter war derart, daß es Licht, welches Wellenlängen hat, die in den Absorptionsspektren der in reiner Luft enthaltenen Gase vorhanden sind, nicht zu dem Detektor hindurchließ. Demgemäß müßte es so sein, daß keine Änderung im Signal des Detektors aufgezeichnet wird. Wie man jedoch aus Fig. 1 ersehen kann, nimmt das Detektorausgangssignal mit zunehmender Umgebungstemperatur ab. Speziell ist es so, daß das Detektorausgangssignal von angenähert 1,45 mV bei angenähert -20°C , wie es bei 10 dargestellt ist, auf angenähert 0,95 mV bei angenähert 50°C , wie es bei 12 dargestellt ist, abnimmt. Diese Abnahme in der Größe des Ausgangssignals würde normalerweise eine Zunahme in der Konzentration des Gases, das detektiert wird und demgemäß absorbiert, anzeigen. Eine solche Zunahme der Konzentration lag aber nicht vor. Demgemäß zeigt die Fig. 1 deutlich, daß ein konventioneller Gasanalysator, der zum Bestimmen der Konzentration eines Gases verwendet wird, nicht zuverlässig ist, wenn eine Änderung in der Umgebungstemperatur auftritt.

Die Fig. 2 ist eine Kurvendarstellung, welche ein Detektorausgangssignal eines konventionellen Gasanalysators in Einheiten von mV in Abhängigkeit der Probenuntersuchungszeit, die in Einheiten von Sekunden aufgetragen ist, veranschaulicht. Diese Daten zeigen, daß ein konventioneller Gasanalysator, der dazu verwendet wird, die Konzentration eines bekannten Gases zu bestimmen, gegenüber dem Einleiten von Gas mit relativ kleiner Konzentration bzw. gegenüber dem Einleiten von relativ kleinen Gaskonzentrationen in die Probenkammer weitgehend unempfindlich ist, wenn eine Änderung in der Umgebungstemperatur auftritt. Bei angenähert 75 Sekunden und 26°C wurde eine Gasmischung, die 0,4% Methan (4000 ppm) enthielt, in die Probenkammer eingeleitet, und der konventionelle Gasanalysator sprach nur mit einer kleinen, wenngleich bemerkbaren Änderung in dem Ausgangssignal von angenähert einem 0,025 mV-Abfall im Ausgangssignal an, wie bei 14a ersichtlich ist. Diese Probengasmischung, die 0,4% Methan enthielt, wurde dann unter Verwendung von reiner Luft aus der Probenkammer abgeführt. Beim Füllen der Probenkammer mit reiner Luft änderte sich die Umgebungstemperatur von angenähert 26°C auf angenähert 50°C , und das Ausgangssignal nahm ab, wie bei 15 gezeigt ist.

Nachdem die 0,4%-Methanmischung unter Verwendung von reiner Luft aus der Kammer abgeführt worden

war, wurden Gasmischungen, die 0,1% (1000 ppm), 0,2% (2000 ppm), 0,3% (3000 ppm) und 0,4% (4000 ppm) Methan enthielten, aufeinanderfolgend eingeleitet und dann unter Verwendung von reiner Luft aus der Kammer abgeführt, und zwar beginnend bei angenähert 275 Sekunden und einem Zwischenwert zwischen angenähert 26°C und 50°C. Das Einführen der Gasmischungen, die 0,1%, 0,2%, 0,3% und 0,4% Methan enthielten, ergab ein Detektorausgangssignal, wie es bei 16 gezeigt ist. Das Ausgangssignal, welches das Einführen der 0,1% Methan und 0,2% Methan enthaltenden Mischungen veranschaulicht, ist, wie bei 16 ersichtlich ist, nahezu undetektierbar wegen der negativen Neigung oder dem Abfallen des Ausgangssignals, die bzw. das aus der Änderung der Umgebungstemperatur von angenähert 26°C auf angenähert 50°C resultierte.

Nach dem Abführen der 0,4% Methan enthaltenden Probengasmischung aus der Probenkammer unter Verwendung von reiner Luft, wurde eine 0,1% Methan enthaltende Mischung in die Kammer bei angenähert 900 Sekunden eingeleitet, wie bei 18 veranschaulicht ist. Das Detektorausgangssignal, welches das Einleiten der 0,1%-Methanmischung in die Probenkammer anzeigt, ist kaum bemerkbar, und zwar aufgrund der relativ steilen positiven Neigung bzw. des relativ steilen Anstiegs, die bzw. das durch die Änderung der Umgebungstemperatur von angenähert 50°C auf angenähert -20°C erzeugt wurde.

Die Änderungen in dem Ausgangssignal bei 20 sind nahezu verschwindend klein wegen der steilen positiven Neigung, die von der Änderung der Umgebungstemperatur von angenähert 50°C auf angenähert -20°C herrührt. In entsprechender Weise ist, während sich die Umgebungstemperatur von angenähert -20°C auf angenähert 26°C änderte, das Einführen und Abführen von Gasprobenmischungen, die 0,1% und 0,2% Methan enthielten, beginnend bei angenähert 1500 Sekunden, wie bei 22 gezeigt ist, in dem Detektorausgangssignal kaum unterschiedbar. Schließlich wurden Gasprobenmischungen, die 0,1%, 0,2%, 0,3% und 0,4% Methan hatten, wie bei 24 gezeigt ist, aufeinanderfolgend eingeleitet und aus der Probengaskammer abgeführt. Die Änderungen, die daraus bei 24 in dem Ausgangssignal resultierten, sind ebenfalls nur schwer bzw. nur sehr schlecht bemerkbar. Da die in Fig. 2 gezeigten Ausgangssignale kaum oder nur sehr schlecht bemerkbar sind, kann die gesuchte Konzentration aus der Kurve nicht genau oder fast überhaupt nicht gemessen werden.

Es sei nun die der vorliegenden Erfindung am nächsten kommende Technik, insbesondere der nächstliegende Stand der Technik, erläutert:

In einigen Gasanalyseinrichtungen nach dem Stande der Technik versucht man, die nachteiligen Wirkungen, die aus einer Änderung in der Umgebungstemperatur resultieren, dadurch zu kompensieren, daß man einen konventionellen Gasanalysator mit einer zweiten, Bezugskammer versieht, die ein bekanntes Bezugsgas mit einer bekannten Gaskonzentration enthält. Die Gaskonzentrationsdaten sowohl von der Probenkammer als auch von der zweiten, Bezugskammer, werden aufgenommen, und die von der Probenkammer erzeugten Daten werden unter Verwendung der von der als zweite Kammer vorgesehenen Bezugskammer erzeugten Daten kalibriert, mit dem Ziel, auf diese Weise den Temperatureffekt zu eliminieren. Ein Beispiel dieser Art von Einrichtung ist in dem Mantz et al. erteilten U.S. Patent 4 937 448 beschrieben. Die zweite, als Bezugskammer vorgesehene Kammer, die ein bekanntes Bezugsgas enthält, ist in Längsfluchtung mit einer Probenkammer positioniert, wobei Laserlicht durch die beiden in Längsrichtung fluchtenden Kammern hindurchgeschickt wird und Isotopenmessungen durchgeführt werden. Die Isotopenkonzentration des Probengases wird dann durch Subtrahieren der bekannten Isotopenkonzentration des bekannten Bezugsgases von der aktuell gemessenen Isotopenkonzentration bestimmt.

Eine andere Art von Gasanalysator, in den eine zweite Kammer als Bezugskammer eingebaut ist, ist in dem Kotaka et al. erteilten U.S. Patent 4 157 470 beschrieben. Der Gasanalysator umfaßt eine Probenkammer, eine Temperaturkompensationszelle, eine als Bezugskammer vorgesehene zweite Kammer, die ein bekanntes Gas mit einer bekannten Konzentration enthält, und eine Interferenzzelle. Die Probenkammer und die Temperaturkompensationszelle sind in Längsfluchtung derart positioniert, daß das Licht durch beide hindurchgeht. In entsprechender Weise sind die als Bezugskammer vorgesehene zweite Kammer und die Interferenzzelle auch in Längsfluchtung derart positioniert, daß das Licht sowohl durch die Kammer als auch durch die Interferenzzelle hindurchgehen kann. Das Ausgangssignal der Probenkammer wird durch Verwendung der Daten von der Interferenzzelle, der zweiten, als Bezugskammer vorgesehenen Kammer und der Temperaturkompensationszelle kalibriert.

Der Nachteil eines Gasanalysators, der eine Bezugskammer als zweite Kammer hat, besteht darin, daß es sein kann, daß die physischen und/oder physikalischen Eigenschaften der Probenkammer nicht identisch mit jenen der als Bezugskammer vorgesehenen zweiten Kammer sind. Demgemäß kann das von der als Bezugskammer vorgesehenen zweiten Kammer gemessene Ausgangssignal ein fehlerhaftes Probenkammer-Ausgangssignal verursachen, weil die beiden Kammern nicht identischen Bedingungen ausgesetzt sind.

In anderen Einrichtungen nach dem Stande der Technik werden zwei Detektoren und zwei Lichtbündel verwendet, um die Ungenauigkeiten zu kompensieren, die in konventionellen Gasanalysatoren aufgrund einer Änderung in der Umgebungstemperatur auftreten. Einer der Detektoren ist mit einem Bandpaßfilter versehen, das für das Absorptionsspektren des Gases, welches detektiert wird, empfindlich ist. Der zweite Detektor ist mit einem zweiten Bandpaßfilter versehen, das für die Hintergrundumgebung der Probenkammer empfindlich ist. Das von dem Hintergrunddetektor erzeugte Ausgangssignal wird von dem Ausgangssignal subtrahiert, welches der Detektor erzeugt, der das zu detektierende Gas detektiert. Der Nachteil einer Einrichtung dieser Art besteht insbesondere darin, daß es sein kann, daß die physischen und/oder physikalischen Eigenschaften der Probenkammer, die die beiden Detektoren enthält, nicht gleichförmig sind. Z.B. können die beiden Detektoren auf die gleiche Temperaturänderung zu verschiedenen Zeitpunkten ansprechen. Wenn die Temperaturänderung nicht gleichförmig überall in der Kammer ist, ist das Ausgangssignal fehlerhaft. Ein Beispiel einer Einrichtung dieser Art ist in dem Asano et al. erteilten U.S. Patent 5 013 920 beschrieben.

In anderen NDIR-Gasanalysatoren nach dem Stand der Technik versucht man, den nachteiligen Wirkungen einer Änderung in der Umgebungstemperatur dadurch entgegenzuwirken, daß der Gasanalysator mit einem

Temperatursteuer- bzw. -regelement versehen wird. Ein nichtdispersiver Gasanalysator dieser Art ist in dem Wong erteilten U.S. Patent 5 163 332 beschrieben. Das Temperatursteuer- bzw. -regelement in diesem Gasanalysator wird speziell dazu benutzt, zu verhindern, daß die Probenkammer eine Temperatur oberhalb der Taupunkttemperatur erreicht, damit vermieden wird, daß eine Kondensation auf der Probenkammeroberfläche auftritt. Das Temperatursteuer- bzw. -regelement dient nicht dazu, die Probengaskammer auf einer gleichförmigen und konstanten Temperatur zu halten, sondern es dient lediglich dazu, die Probenkammertemperatur oberhalb des Taupunkts zu halten. Selbst leichte Änderungen in der Temperatur können aber einen konventionellen Gasanalysator nachteilig beeinflussen. Selbst wenn man in der Lage wäre, die Temperatur derart zu regeln, daß jede Änderung in der Temperatur verhindert würde, ist es jedoch weiterhin so, daß sich die Erhöhung des Betrags der elektrischen Leistung und die Erhöhung der Abmessungen des Gasanalysators, die zum Konstanthalten der Temperatur notwendig wären, verbieten, weil sie die Benutzung der Einrichtung — die vorwiegend als tragbare Einrichtung verwendet werden soll — weitgehend verhindern würden.

In einer noch anderen Art einer Einrichtung nach dem Stande der Technik ist eine Lichtquelle vorgesehen, die elektronisch zwischen einem eingeschalteten und ausgeschalteten Zustand gepulst wird, derart, daß der Detektor einen unterbrochenen Lichtstrom erhält, durch den ein Ausgangssignal erzeugt wird, das zur Basislinie zurückkehrt, wenn die Lichtquelle in dem ausgeschalteten Zustand ist. Der Nachteil dieses Verfahrens besteht insbesondere darin, daß die Einrichtung nicht zwischen einer Änderung im elektrischen Signal, welches durch niederfrequentes elektrisches Rauschen erzeugt wird, und kleinen Änderungen im Ausgangssignal, welche durch Gas, das Licht absorbiert, erzeugt wird, unterscheiden kann. Rauschen kann z. B. durch das Erwärmen der Lampe und das Abkühlen oder Aufheizen aufgrund langer thermischer Zeitkonstanten der Thermosäule erzeugt werden, so daß sich derartige, die Funktionsweise der Einrichtung beeinträchtigendes Rauschen praktisch nicht vermeiden läßt. Ein Beispiel einer Einrichtung dieser Art ist in dem Burough et al. erteilten U.S. Patent 4 709 150 offenbart.

Die Aufgabe der vorliegenden Erfindung ist es daher im Hinblick auf den vorgenannten Stand der Technik insbesondere, ein Verfahren und eine Einrichtung zur Verfügung zu stellen, mit denen die Konzentration einer bekannten Substanz, vorzugsweise eines bekannten Fluids, besonders bevorzugt eines bekannten Gases, bestimmt werden kann und welche hierbei für Änderungen in der Umgebungstemperatur unempfindlich oder doch zumindest weitestgehend unempfindlich sind.

Gemäß der vorliegenden Erfindung werden daher ein Verfahren und eine Einrichtung zum Bestimmen der Konzentration einer bekannten Substanz, vorzugsweise eines bekannten Fluids, besonders bevorzugt eines bekannten Gases in einer Probengasmischung, zur Verfügung gestellt, die für Änderungen in der Umgebungstemperatur unempfindlich oder doch weitestgehend unempfindlich sind. Das Verfahren umfaßt im wesentlichen die Schritte des Vorsehens von Licht, das durch die Probe, insbesondere durch eine für die Probe vorgesehene Kammer, hindurchgeht; das Einführen der Probe in den Weg des Lichts, insbesondere das Einleiten einer Probenfluidmischung, vorzugsweise einer Probengasmischung, in die Kammer; das Detektieren des durch die Probe hindurchgegangenen Lichts, insbesondere das Detektieren des Lichts in der Kammer; das Erzeugen eines elektrischen Ausgangssignals; das Messen des Ausgangssignals während einer Mehrzahl von Augenblickszeit-dauern; das Berechnen der Änderung des Ausgangssignals (diese Änderung wird nachstehend auch als CS bezeichnet, wobei C für das dem deutschen Wort Änderung entsprechende englische Wort "Change" und S für Signal steht); das Berechnen der Änderung von der Änderung des Ausgangssignals (diese berechnete Änderung der Änderung wird nachstehend auch mit CCS bezeichnet, wobei C und S dieselben Bedeutungen wie in dem vorstehend erläuterten Ausdruck CS haben und CC daher "die Änderung der Änderung" bedeutet); und das Vergleichen der CCS-Daten mit entsprechenden CCS-Daten für die bekannte Substanz, vorzugsweise das bekannte Fluid, besonders bevorzugt das bekannte Gas, mit einer bekannten Konzentration in einem Bereich von bekannten Temperaturen.

Weiterhin ist gemäß der Erfindung vorgesehen, daß das mit CCS-Daten arbeitende erfindungsgemäße Verfahren ein wiederholtes Einschalten und Ausschalten der Lichtquelle umfaßt, so daß unterbrochene Lichtstrahlung durch die Probe, insbesondere durch die in der Kammer befindliche Probe, erzeugt wird, und daß Licht detektiert wird, wenn es durch die Probe hindurchgegangen ist, insbesondere in der Probenkammer vorhanden ist, und wenn das Licht nicht durch die Probe hindurchgegangen ist, insbesondere in der Probenkammer abwesend ist. Durch diese Technik wird eine Null-Basislinie erzeugt, von der aus alles mittels des Detektors detektierte Licht gemessen werden kann.

Gemäß einem anderen Aspekt des erfindungsgemäßen Verfahrens zum Bestimmen der Konzentration einer bekannten Substanz, insbesondere eines bekannten Fluids, bevorzugt eines bekannten Gases, kann gemäß der Erfindung der Schritt des Detektierens des Lichts das Vorsehen einer Bezugssubstanz, vorzugsweise in der Form einer abgedichteten oder verschlossenen zweiten Kammer, die als Bezugskammer vorgesehen ist, welche eine bekannte Probe, insbesondere ein bekanntes Fluid, bevorzugt ein bekanntes Gas, enthält, die bzw. das eine bekannte Konzentration hat, sowie das alternative Detektieren der Menge an Licht, die durch die Probe hindurchgegangen ist, insbesondere das Detektieren der Menge des Lichts in der Probenkammer, und der Menge des Lichts, die durch die Bezugssubstanz hindurchgegangen ist, vorzugsweise der Menge des Lichts in der zweiten Kammer, die als Bezugskammer vorgesehen ist, umfassen.

Ein noch anderer Aspekt des Verfahrens nach der Erfindung zum Bestimmen der Konzentration einer bekannten Substanz, vorzugsweise eines bekannten Fluids, besonders bevorzugt eines bekannten Gases, besteht darin, daß der Verfahrensschritt des Erzeugens eines elektrischen Ausgangssignals den Verfahrensschritt des Vorsehens einer Datenbank umfassen kann, die CCS-Daten enthält, welche von einer bekannten Substanz, vorzugsweise von einem bekannten Fluid, besonders bevorzugt von einem bekannten Gas, mit einer bekannten Konzentration in einem bekannten Temperaturbereich erzeugt worden sind, sowie den Verfahrensschritt des abwechselnden Zugreifens auf die CCS-Daten von der Datenbank und die von der Probe, insbesondere in der

Probenkammer, erzeugten CCS-Daten.

Weiterhin werden mit der vorliegenden Erfindung mehrere Verfahrensweisen zur Verfügung gestellt, mit denen die CCS-Daten verglichen werden können. Eine Verfahrensweise des Vergleichens der CCS-Daten besteht nach der Erfindung darin, die Spitzenwerte der von der Probe, insbesondere mittels der Probenkammer erzeugten CCS-Daten mit den Spitzenwerten der von einer bereits existierenden oder erstellten Datenbank gelieferten CCS-Daten der gleichen Probe, besonders bevorzugt des gleichen Gases, die bzw. das eine bekannte Konzentration in einem bekannten Bereich von Temperaturen hat, zu vergleichen.

Eine andere Verfahrensweise des Vergleichens der CCS-Daten besteht erfindungsgemäß darin, die Summation bzw. Summe der Absolutwerte der von der Probe her, insbesondere von der Probenkammer her, erzeugten CCS-Daten mit der Summation bzw. Summe der Absolutwerte der durch eine vorher existierende bzw. vorher erstellten Datenbank gelieferten Absolutwerte der CCS-Daten der gleichen Probe, besonders bevorzugt des gleichen Gases, die bzw. das eine bekannte Konzentration in einem bekannten Bereich von Temperaturen hat, zu vergleichen.

Eine noch andere erfindungsgemäße Verfahrensweise des Vergleichens der CCS-Daten besteht darin, eine Summation bzw. Summe der von der Probe her, insbesondere von der Probenkammer her, erzeugten CCS-Daten, multipliziert mit dem entsprechenden Zeitintervall, mit der Summation bzw. Summe von CCS-Daten, multipliziert mit dem entsprechenden Zeitintervall, zu vergleichen, wobei die letzteren CCS-Daten von einer vorher existierenden bzw. vorher erstellten Datenbank geliefert werden, welche CCS-Daten für die gleiche Probe (gleiche Substanz, vorzugsweise gleiches Fluid, besonders bevorzugt gleiches Gas) bei bekannten Konzentrationen und in einem bekannten Bereich von Temperaturen enthält.

Darüberhinaus wird mit der vorliegenden Erfindung eine Einrichtung zum Durchführen des erfindungsgemäßen Verfahrens der Bestimmung der Konzentration einer bekannten Substanz in einem Probensubstanzgemisch, vorzugsweise eines bekannten Fluids in einem Probenfluidgemisch, besonders bevorzugt eines bekannten Gases in einer Probengasmischung, zur Verfügung gestellt. Die Einrichtung umfaßt im wesentlichen einen Probenaufnehmer, vorzugsweise eine Probenkammer, wie beispielsweise eine Fluid- oder Gaskammer; eine Infrarotlichtquelle; einen Detektor, der so positioniert ist, daß er Infrarotlicht detektiert, welches durch die Probe hindurchgegangen ist, wobei der Detektor, insbesondere für die Bestimmung der Konzentration eines Fluids, bevorzugt eines Gases, vorzugsweise in der Probenkammer angeordnet ist; einen Signalumwandler; und eine Datenerfassungs- und Mikroprozessoreinheit zum Messen des Ausgangssignals in einer Mehrzahl von augenblicklichen Zeitdauern und/oder zum Verarbeiten des Ausgangssignals umfaßt. Die Datenerfassungs- und Mikroprozessoreinheit hat einen Speicher mit einem Programm, welches sowohl die Änderung (CS) des Ausgangssignals als auch die Änderung der Änderung (CCS) des Ausgangssignals berechnen kann.

Ein noch anderer Aspekt der erfindungsgemäßen Einrichtung zum Bestimmen der Konzentration an einer bekannten Substanz, vorzugsweise an einem bekannten Fluid, besonders bevorzugt an einem bekannten Gas, besteht darin, daß ein optisches Bandpaßfilter für ein schmales optisches Band oder schmale optische Bänder, positioniert vor dem Detektor, vorgesehen ist, welches nur den Durchgang von solchem Licht durch dasselbe ermöglicht, das Wellenlängen hat, die für das Absorptionsspektrum der detektierten Substanz, vorzugsweise des detektierten Fluids, besonders bevorzugt des detektierten Gases, spezifisch sind, so daß es demgemäß alle anderen Wellenlängen ausfiltert.

Schließlich ist in einer besonders bevorzugten Ausführungsform der erfindungsgemäßen Einrichtung die Datenerfassungs- und Mikroprozessoreinheit mit einer Datenbank versehen, welche Ausgangssignale und/oder CCS-Daten für Konzentrationen von bekannten Substanzen, vorzugsweise von bekannten Fluiden, besonders bevorzugt von bekannten Gasen, in einem Bereich von bekannten Temperaturen enthält. Die Datenbank kann besonders bevorzugt Spitzenwerte von CCS-Daten, eine Summation bzw. Summe oder mehrere Summationen bzw. Summen der Absolutwerte der CCS-Daten und/oder eine Summation bzw. Summe oder mehrere Summationen bzw. Summen von CCS-Daten, die mit ihrem entsprechendem Zeitintervall bzw. ihren entsprechenden Zeitintervallen multipliziert ist bzw. sind, enthalten.

Die vorstehenden sowie weitere Vorteile und Merkmale der Erfindung seien nachfolgend anhand von besonders bevorzugten Ausführungsformen des erfindungsgemäßen Verfahrens und der erfindungsgemäßen Einrichtung, die sich auf die besonders bevorzugte Bestimmung der Konzentration an einem bekannten Gas in einer Gasprobenmischung beziehen, die jedoch in entsprechender Weise für die Bestimmung der Konzentration an einem Feststoff oder an einer Flüssigkeit geltend unter Bezugnahme auf die Fig. 3 bis 7 der Zeichnung näher beschrieben und erläutert; es zeigen:

Fig. 1 eine Kurvendarstellung eines Ausgangssignals, wie es von einem konventionellen Gasanalysator erzeugt wird, wobei die Probenkammer desselben reine Luft in einem Temperaturbereich von angenähert -20°C bis angenähert 50°C enthält;

Fig. 2 eine Kurvendarstellung eines von einem konventionellen Gasanalysator erzeugten Ausgangssignals, wobei die Probenkammer dieses konventionellen Gasanalysators mit Probengasmischungen gefüllt und dann von diesen Probengasmischungen entleert wurde, welche zwischen 0,1 % bis 0,4 % Methan bei Raumtemperatur enthielten, wobei sich die Temperaturen über die Zeit hinweg und während des Einströmens, Verweilens und Ausströmens des Gases im Bereich von angenähert 26°C bis zu angenähert 50°C sowie bis zu angenähert -20°C und zurück bis zu angenähert 26°C änderten;

Fig. 3 eine mehr schematische Darstellung einer bevorzugten Ausführungsform einer erfindungsgemäßen Einrichtung in der Form einer Gasanalyseeinrichtung zum Bestimmen der Konzentration eines bekannten Gases in einer Probenmischung;

Fig. 4 eine graphische Darstellung eines Ausgangssignals, das unter Verwendung der in Fig. 3 gezeigten Gasanalyseeinrichtung erhalten worden ist;

Fig. 5a das gleiche Ausgangssignal, wie es in Fig. 4 gezeigt ist, jedoch als digitales Ausgangssignal veranschau-

licht;

Fig. 5b eine graphische Darstellung der Änderung bzw. zeitlichen Änderung (CS) des in Fig. 5a gezeigten Ausgangssignals;

Fig. 5c eine graphische Darstellung der Änderung der Änderung (CCS) bzw. der zeitlichen Änderung der zeitlichen Änderung des in Fig. 5a gezeigten Ausgangssignals;

Fig. 6 eine Kurvendarstellung der CCS-Daten, die unter Verwendung einer bevorzugten Ausführungsform des Verfahrens und der Einrichtung nach der Erfindung in der Form eines Verfahrens und einer Einrichtung zum Bestimmen der Gaskonzentration entwickelt bzw. erhalten worden sind, worin die Probengaskammer mit Probengasmischungen gefüllt und dann von diesen Probengasmischungen entleert wurde, welche zwischen 0,1% bis 0,4% Methan enthielten, ähnlich jenen, wie sie in Fig. 2 gezeigt sind; und

Fig. 7 eine graphische Darstellung einer Methankalibrierkurve, die unter Verwendung der bevorzugten Ausführungsform des Verfahrens und der Einrichtung nach der Erfindung zum Bestimmen von Gaskonzentrationen entwickelt bzw. erstellt worden ist.

In der nun folgenden detaillierten Beschreibung von bevorzugten Ausführungsformen der Erfindung sei zunächst auf Fig. 3 Bezug genommen, die eine gegenwärtig bevorzugte Ausführungsform einer erfindungsge-
mäßigen Einrichtung in der Form eines Gasanalysators 26 zeigt, der im wesentlichen folgendes umfaßt: eine Probengaskammer 28, die einen Einlaß 30 und einen Auslaß 32 hat; eine Infrarotlichtquelle 34; einen Detektor 36, der mit einer Schaltungskarte oder -platte 38 verbunden ist; ein optisches Bandpaßfilter 40; einen Verstärker 42; einen Analog-zu-Digital-Umsetzer 44 (wobei nachstehend auf die Abkürzung AD für Analog-zu-Digital verwendet wird); und eine Datenerfassungs- und Mikroprozessoreinheit 46. Die Infrarotlichtquelle 34 und der Detektor 36 sind beide innerhalb der Probengaskammer 28 positioniert, wobei es sich versteht, daß die Infrarotlichtquelle 34 mit einer Stromquelle (nicht gezeigt) verbindbar ist. Die Infrarotlichtquelle 34 kann eine Glühlampe, wie auch ein Laser, ein keramischer Infrarotstrahler oder eine lichtemittierende Diode (LED) oder eine andere geeignete Infrarotlichtquelle sein. Der Detektor 36 ist vorzugsweise eine Thermosäule, aber er kann auch ein pyroelektrischer Infrarotdetektor, ein Halbleiterinfrarotdetektor oder irgendein anderer geeignete Infrarotdetektor sein. Der Detektor 36 ist vorliegend auf der Schaltungskarte bzw. -platte 38 angebracht. Unter der Vielzahl von kommerziell erhältlichen Komponenten, die als Lichtquelle, Detektor und/oder Datenerfassungs- und Mikroprozessoreinheit verwendet werden können, seien hier als Beispiele die folgenden Komponenten angegeben, die sich in einer praktischen Ausführungsform als geeignet erwiesen haben:

<u>Komponente</u>	<u>Komponenten-Nr.</u>	<u>Bezugsquelle</u>	<u>Bezugszeichen</u>
Lichtquelle	133	Carley	34
Detektor	2M	Dexter	36
Datenerfassungs- und Mikroprozessoreinheit	PC Lab Plus Plus	National Instrument	46

Im Betrieb wird, nachdem die Lichtquelle 34 eingeschaltet worden ist, so daß Licht durch die Probengaskammer 28 hindurchgeht, eine Probengasmischung (nicht gezeigt) durch den Einlaß 30 in die Probenkammer 28 eingeleitet. Da das Gas, welches innerhalb der Probenmischung detektiert werden soll, bekannt ist, ist auch das Wellenlängenabsorptionsspektrum des Gases bekannt. Demgemäß wird der Detektor 36 mit einem optischen Bandpaßfilter 40 versehen, das nur solche Wellenlängen durchläßt, die von dem zu detektierenden Gas absorbiert werden und andere Wellenlängen ausfiltert. Wenn der Detektor 36 das Licht innerhalb der Probenkammer 28 detektiert hat, erzeugt die Schaltungskarte bzw. -platte 38 ein elektrisches Ausgangssignal, das eine Funktion des detektierten Lichts ist. Das elektrische Ausgangssignal wird dann in den Verstärker 42 eingegeben. Nach der Verstärkung des Ausgangssignals wird das Ausgangssignal dann mittels des A/D-Umsetzers 44 von einem Analogsignal in ein Digitalsignal umgewandelt. Das verstärkte digitale Ausgangssignal wird dann in die Datenerfassungs- und Mikroprozessoreinheit 46 eingegeben.

Die Datenerfassungs- und Mikroprozessoreinheit 46 ist mit einem Speicher versehen, der ein Programm enthält, welches CS-Daten, CCS-Daten, eine Summation bzw. Summe der Spitzenwerte der CCS-Daten, und eine Summation bzw. Summe der CCS-Werte, multipliziert mit dem Zeitintervall, berechnet. Die Datenerfassungs- und Mikroprozessoreinheit 46 kann auch eine graphische Darstellung von allen berechneten Daten wie auch eine graphische Darstellung des digitalen Ausgangssignals erzeugen. Obwohl die Datenerfassungs- und Mikroprozessoreinheit 46 vorliegend als eine einzige Einheit oder Einrichtung veranschaulicht ist, können anstelle der Einheit 46 zwei oder mehr Einheiten oder Einrichtungen vorgesehen sein oder die Einheit 46 kann durch zwei oder mehr Einheiten bzw. -einrichtungen verwirklicht sein. Z.B. kann der Aufbau so sein, daß eine erste Einrichtung das Ausgangssignal von dem A/D-Umsetzer 44 zu einer zweiten Einrichtung überträgt, die ein Mikroprozessor ist oder einen Mikroprozessor umfaßt, der einen Speicher hat und fähig ist, die CCS-Daten zu berechnen.

Die Fig. 4, 5a, 5b und 5c veranschaulichen Kurven, welche durch die Datenerfassungs- und Mikroprozessoreinheit 46 erzeugt wurden, als eine Methan enthaltende Probengasmischung wiederholt in die Probengaskammer 28 des Gasanalysators 26 eingeleitet und aus dieser Probengaskammer 28 abgeführt wurde. Es wird zunächst speziell auf die Fig. 4 und 5a B zug genommen, welche beide im wesentlichen die gleichen Daten zeigen, und aus diesen beiden Figuren ist ersichtlich, daß die Umgebungstemperaturänderung von T_1 zu T_2 die Zuverlässigkeit des Ausgangssignals nicht ilig beeinflusst.

Anfänglich war Luft innerhalb der Probengaskammer 28, was durch ein Grundliniensignal bei 48 angedeutet ist, das angenähert 1,3 mV beträgt. Als die Probengasmischung in die Probengaskammer 28 eingeleitet wurde, sprach das Ausgangssignal mit einer negativen Neigung bei 50 an, was anzeigt, daß das Gas innerhalb der Probengaskammer 28 das Licht bei einer Wellenlänge innerhalb des durch das optische-Bandpaßfilter 40 ausgewählten Spektrums absorbierte. Als alle Luft im wesentlichen aus der Probengaskammer 28 abgeführt war und die Probengasmischung die Probengaskammer 28 im wesentlichen füllte, wurde ein konstantes Ausgangssignal erhalten, das angenähert 1,2 mV war, nämlich das bei 52 dargestellte Ausgangssignal. Als die Probengasmischung aus der Probengaskammer 28 abgeführt wurde, zeigte das Ausgangssignal eine positive Neigung, wie bei 54 dargestellt ist, bis es schließlich zu der Grundlinie zurückkehrte, wie durch das Ausgangssignal bei 56 veranschaulicht ist. Das auf der Grundlinie verlaufende Ausgangssignal bei 56 war konstant und angenähert gleich 1,3 mV, was anzeigt, daß das Gas innerhalb der Probengaskammer 28 im wesentlichen alles Luft war. Wie ersichtlich ist, absorbierte die Luft kein Licht innerhalb der Probengaskammer 28 bei der durch das Bandpaßfilter 40 spezifizierten Wellenlänge.

Obwohl die Luft innerhalb der Probengaskammer 28 die gleiche blieb, als sich die Umgebungstemperatur von T_1 zu einem Übergangszustand änderte, verschob sich die Grundlinie beginnend bei 58 fortlaufend bis zu 60.

Zu einem Überwachungs- bzw. Meßzeitpunkt, der bei angenähert 20 Sekunden lag, wurde die vorher eingeleitete Probengasmischung erneut bei 60 in die Probengaskammer 28 eingeleitet, und die Luft wurde ein zweites Mal aus der Probengaskammer 28 abgeführt. Dieses wird durch die negative Neigung bei 62 wiedergegeben. Als im wesentlichen alle Luft aus der Probengaskammer 28 abgeleitet worden war und die Probengasmischung die Probengaskammer 28 im wesentlichen füllte, erfuhr das Ausgangssignal, wie bei 64 gezeigt ist, eine Änderung in der Neigung. Da sich die Umgebungstemperatur im Übergangszustand konstant bzw. fortwährend änderte, erreichte das Ausgangssignal keinen konstanten Wert, als alle Luft aus der Probengaskammer 28 entleert und die Probengaskammer 28 im wesentlichen mit der Probengasmischung gefüllt war, und zwar im Gegensatz zu dem Fall der vorherigen Einleitung der Probengasmischung in die Probengaskammer 28, der bei 52 gezeigt ist und bei dem ein konstantes Ausgangssignal erhalten worden war. Die konstante bzw. fortwährende Änderung der Temperatur erzeugte eine negative Neigung in dem Ausgangssignal, wie bei 64 dargestellt ist. Die Probengasmischung wurde dann aus der Probengaskammer 28 abgeführt, was durch die positive Neigung des Ausgangssignal bei 66 wiedergegeben ist.

Als die Probengaskammer 28 erneut im wesentlichen nur mit Luft gefüllt wurde, kehrte das Ausgangssignal zu einer Grundlinie zurück, die vorliegend eine negative Neigung hatte, beginnend bei 68 und weitergehend bis zu 69, wo die Temperatur den Wert T_2 erreichte. Die Tatsache, daß die Grundlinie zwischen 68 und 69 eine negative Neigung hat, rührt daher, daß sich die Umgebungstemperatur in dem Übergangszustand konstant bzw. fortwährend änderte.

Obwohl die Luft innerhalb der Probengaskammer 28 die gleiche blieb, während sich die Umgebungstemperatur von dem Übergangstemperaturzustand auf T_2 änderte, erfuhr die Grundlinie also eine Neigung, die man erkennt, wenn man das Ausgangssignal zwischen 68 und 69 mit dem Ausgangssignal bei 70 vergleicht, und sie erfuhr weiterhin eine Verschiebung, wenn man das auf der Grundlinie 70 befindliche Ausgangssignal mit dem Ausgangssignal auf der Grundlinie 56 vergleicht.

Als die Methan enthaltende Probengasmischung ein drittes Mal in die Probengaskammer 28 eingeleitet wurde, führt das dazu, daß das Ausgangssignal eine negative Neigung annahm, wie bei 72 dargestellt ist. Als im wesentlichen alle Luft abgeführt und die Probengaskammer 28 im wesentlichen mit der Probengasmischung gefüllt war, wies das Ausgangssignal, wie bei 74 gezeigt ist, ein konstantes Niveau auf, das angenähert 1,05 mV betrug. Als dann die Probengasmischung aus der Probengaskammer 28 abgeführt wurde, nahm das Ausgangssignal, wie bei 76 gezeigt ist, die Form einer positiven Neigung an. Nachdem im wesentlichen das gesamte Probengas aus der Probengaskammer 28 entleert worden war und die Probengaskammer 28 im wesentlichen nur Luft enthielt, kehrte das Ausgangssignal, wie bei 78 veranschaulicht ist, zu einer Grundlinie zurück, deren Niveau angenähert 1,14 mV ist.

Dieses Experiment veranschaulicht sehr deutlich und drastisch die Ungenauigkeit der konventionellen Gasanalysatoren beim Bestimmen der Konzentration eines Gases während einer Umgebungstemperaturänderung. Obwohl die Konzentration des detektierten Gases während der drei Male, in denen die Probengasmischung in die Probengaskammer 28 eingeleitet und aus der Probengaskammer 28 abgeführt wurde, im wesentlichen die gleiche blieb, wies das Ausgangssignal, welches der Gaskonzentration umgekehrt proportional ist, eine ganz beträchtliche Änderung zwischen dem ersten Einleiten der Probengasmischung bei 52 und dem dritten Einleiten der Probengasmischung bei 74 auf. Diese Änderung wird besonders klar ersichtlich, wenn man die Grundliniendrift 79 betrachtet.

Als das Ausgangssignal erhalten wurde, transformierte der A/D-Umsetzer 44 das in Fig. 4 gezeigte Ausgangssignal in das digitale Ausgangssignal S, das in Fig. 5a dargestellt ist. Das digitale Ausgangssignal S wurde dann von der Datenerfassungs- und Mikroprozessoreinheit 46 dazu benutzt, die Änderung (CS) bzw. zeitliche Änderung (CS) des Signals zu berechnen.

Fig. 5b veranschaulicht die Änderung (CS) bzw. zeitliche Änderung (CS) des Ausgangssignals. Um die Kurve der Fig. 5b zu erzeugen, wurden die Probenausgangssignale $S_1, S_2, S_3, S_4, \dots, S_{n-1}, S_n, S_{n+1} \dots$ gemessen und dazu verwendet, CS zu berechnen. Es erscheint überflüssig, hier darauf hinzuweisen, daß n im Rahmen der vorliegenden Ausführungen im allgemeinen bevorzugt eine beliebige ganze positive Zahl ist, die natürlich, wenn n innerhalb einer Reihe, wie vorstehend, vorkommt, größer als die vorhergehend angegebenen Zahlen, also in der vorstehenden Reihe mehrere Einserschritte größer als 4 ist. Es sei nun wieder zu der Berechnung der CS-Werte zurückgekehrt. CS_1 ist gleich dem zweiten Ausgangssignal minus dem ersten Ausgangssignal, d. h., $CS_1 = S_2 - S_1$. Im allgemeinen wird CS dahingehend berechnet, daß vom gegenwärtigen oder vorliegenden Ausgangssignal das vorhergehende subtrahiert wird, d. h. $CS_{n-1} = S_n - S_{n-1}$. Die Größe CS_{n-1} könnte auch als

die relative Differenz zwischen S_n und S_{n-1} berechnet bzw. bezeichnet werden. Vergleicht man die in den Fig. 4 und 5a veranschaulichte Grundliniendrift 79 mit der in Fig. 5b gezeigten Grundliniendrift, so ist letztere relativ sehr klein, obwohl immer noch eine kleine Drift in dem Übergangstemperaturzustand zwischen T_1 und T_2 bei 80 bzw. 81 detektierbar ist.

Fig. 5c veranschaulicht die Änderung der Änderung (CCS) bzw. die zeitliche Änderung der zeitlichen Änderung (CCS) des Signals. CCS wird als $CCS_1 = CS_2 - CS_1$ berechnet und allgemeiner erfolgt die Berechnung nach der Gleichung $CCS_{n-1} = CS_n - CS_{n-1}$, was der zweiten Ableitung des Ausgangssignals äquivalent ist, worin $\Delta t = 1$ ist. Die CCS-Daten können alternativ dadurch berechnet werden, daß man die relative Differenz zwischen CS_n und CS_{n-1} bestimmt, welche dann verwendet werden kann, wenn man die CCS-Daten vergleicht, um die Konzentration des Gases in der Probenmischung zu bestimmen. Die CCS-Gleichung basiert auf der Theorie, wonach die Konzentration des Gases, das detektiert wird, und das Licht, welches durch das Gas absorbiert wird, in einer linearen Beziehung miteinander stehen, die speziell durch das Gesetz von Beer-Lambert ausgedrückt wird, nämlich

$$I = I_0 \exp(-\alpha x) \quad (1)$$

worin I die Intensität des durchgelassenen Lichts ist, die im vorliegenden Fall durch das Ausgangssignal repräsentiert wird; I_0 ist Intensität des einfallenden Lichts; α ist der Absorptionskoeffizient; und x ist der optische Weg durch den Absorbenten bzw. das absorbierende Medium. Vorliegend steht α in direkter Beziehung zu der Art der Substanz, insbesondere des Gases, und der Konzentration der Substanz, insbesondere des Gases, bzw. hängt α direkt von der Art der Substanz, insbesondere des Gases, und der Konzentration der Substanz, insbesondere des Gases, ab. Je höher die Konzentration ist, umso größer ist α . Die Gleichung (1) ist eine lineare Gleichung, welche allgemein ausgedrückt werden kann als:

$$y = f(t) \quad (2)$$

worin y eine Funktion der Zeit ist. Die erste Ableitung ist:

$$\frac{dy}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta y}{\Delta t} \right) \approx \frac{y_2 - y_1}{t_2 - t_1} \quad (3)$$

worin

$$\Delta y = y_2 - y_1 \quad (4)$$

Δy ist die Änderung des Signals, und

$$\Delta t = t_2 - t_1 \quad (5)$$

demgemäß gilt

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = \frac{d(dy/dt)}{dt} \approx \frac{(\Delta y / \Delta t)_2 - (\Delta y / \Delta t)_1}{t_2 - t_1} \quad (6)$$

In diesem Falle ist Δt gleich 1, so daß man demgemäß erhält:

$$\frac{d^2 y}{dt^2} \approx \Delta y_2 - \Delta y_1 \quad (7)$$

welches die Änderung der Änderung (CCS) des Signals ist, d. h., $CCS_{n-1} = CS_n - CS_{n-1}$.

Die Grundliniendrift 79 in Fig. 5a ist in den in Fig. 5c gezeigten CCS-Daten selbst innerhalb des Übergangsbereichs im wesentlichen ausgeschaltet. Das Einleiten einer Gasprobenmischung in die Probengaskammer 28 kann identifiziert werden durch eine negative Spitze, auf die eine positive Spitze folgt, wie z. B. durch die digitalen Ausgangssignale bei 82, 84 und 90, 92 sowie 98, 100, 112 in Fig. 5c veranschaulicht ist. Weiter kann das Abführen bzw. Entleeren einer Gasprobenmischung aus der Probengaskammer 28 identifiziert werden durch eine positive Spitze, auf die eine negative Spitze folgt, wie z. B. durch die digitalen Ausgangssignale 86, 88, 106 und 94, 96 sowie 102, 104 in Fig. 5c veranschaulicht ist. Die CCS-Daten bei 108 und 110 weisen keines der Muster auf und werden deshalb beim Vergleichen der CCS-Daten außer Betracht gelassen.

Die Fig. 6 veranschaulicht CCS-Daten, welche erhalten wurden, als Probengasmischungen, die Methankonzentrationen zwischen 0,1% und 0,4% enthielten, in einem Muster bzw. einer Reihenfolge, welche im wesentlichen die gleiche war wie sie vorher unter Bezugnahme auf Fig. 2 erörtert worden ist, in die Probengaskammer 28 eingeleitet wurden. Die CCS-Daten der Fig. 2 wurden, wie weiter oben bereits angegeben, unter Verwendung

einer konventionellen Gasanalyseinrichtung und eines konventionellen Gasanalyisverfahrens erhalten. Vergleicht man das Ausgangssignal der Fig. 2 mit den CCS-Daten der Fig. 6, dann kann man erkennen, daß das erfindungsgemäße CCS-Verfahren praktisch jede Grundlinienverschiebung ausschaltet. Wie bei der Diskussion der Fig. 2 oben bereits bemerkt wurde, sind die Detektionssignale der 0,1% und 0,2% Methan enthaltenden Probengasmischung, die bei 14, 16, 18, 20, 22, 24 gezeigt sind, fast nicht bemerkbar. Betrachtet man jedoch die Fig. 6, so zeigt diese in geradezu krassm Gegensatz hierzu, daß das CCS-Datensignal, welches in die Probengaskammer 28 eingeleiteten Probengasmischungen entspricht, die 0,1% und 0,2% Methan enthalten, sehr deutlich bemerkbar und meßbar ist. Im einzelnen repräsentieren die Signale bei 18 und 22 in Fig. 2 das Einleiten von jeweils einer Probengasmischung, die 0,1% bzw. 0,2% Methan enthält, in die Probengaskammer 28 der konventionellen Gasanalyseinrichtung, die sich nur sehr schlecht bis kaum vom Untergrund abheben. Im Gegensatz hierzu repräsentieren die Signale bei 114 und 115 in Fig. 6 jeweils eine in die Probengaskammer 28 eingeleitete Probengasmischung, welche ebenfalls jeweils 0,1% bzw. 0,2% Methan enthält, und diese Signale sind ausgezeichnet bemerkbar und meßbar.

Nach dem Berechnen der CCS-Daten können verschiedene Vergleichstechniken dazu benutzt werden, die mittels der erfindungsgemäßen Gasanalyseinrichtung aktuell erzeugten CCS-Daten mit CCS-Daten aus einer bereits existierenden Datenbank für die Substanz, beispielsweise das Gas, welche bzw. welches detektiert wird, zu vergleichen. Die bereits existierende CCS-Datenbank kann dadurch erzeugt werden, daß man CCS-Daten für eine gewisse bzw. vorbestimmte Substanz, z. B. ein gewisses bzw. vorbestimmtes Gas, bei mehreren Temperaturen und mehreren Konzentrationen zusammenstellt.

Die Fig. 7 veranschaulicht eine Ansprech- bzw. Kalibrierungs- bzw. Ermittlungskurve für die Konzentration von Methan zwischen 0% und 100%, welche unter Verwendung des erfindungsgemäßen CCS-Verfahrens und der CCS-Einrichtung nach der Erfindung entwickelt bzw. gemessen worden ist (das Verfahren nach der Erfindung und die erfindungsgemäße Einrichtung können, wie vorstehend geschehen, auch als CCS-Verfahren bzw. CCS-Einrichtung bezeichnet werden). Die Ansprech-, Kalibrierungs- oder Ermittlungskurve wurde durch Summieren aller CCS-Werte und Auftragen der Summen-CCS-Werte in die graphische Darstellung erzeugt. In der als Punktreihe dargestellten Kurve der Fig. 7 repräsentiert jeder aufgezeichnete Punkt in der graphischen Darstellung eine spezielle Konzentration von Methan bei angenähert 26°C. Diese Daten können bei der zukünftigen Bestimmung der Methankonzentration unter Verwendung des erfindungsgemäßen CCS-Verfahrens benutzt werden.

Nachdem die aufgrund der Proben in der Probenkammer 28 erzeugten CCS-Daten berechnet worden sind, beispielsweise an Ort und Stelle von Messungen außerhalb des Labors, kann die Summe der CCS-Daten mit den Daten auf der Ansprech- bzw. Kalibrierungs- bzw. Ermittlungs- oder Eichkurve, wie beispielsweise der Kurve gemäß der Fig. 7, verglichen werden, um die spezielle Gaskonzentration zu finden. Wenn z. B. die Summation bzw. Summe der an Ort und Stelle, beispielsweise außerhalb des Labors, in rauher Außenumgebung, im Bergwerksschacht, in der Werkshalle o. dgl., erzeugten CCS-Werte 100 mV ist, so ergibt sich aus der Fig. 7, daß die entsprechende Konzentration, wie sie bei 116 dargestellt ist, angenähert 7% Methan beträgt. Durch Eingeben der in Fig. 7 gezeigten Ansprech-, Bestimmungs- oder Eichkurve in eine Datenbank in der Datenerfassungs- und Mikroprozessoreinheit 46 können die jeweils neuen Daten, die an Ort und Stelle der Messung ermittelt worden sind, mit den Daten dieser bereits existierenden oder vorher erstellten Datenbank verglichen und die aktuellen Konzentrationswerte des Methans in einer Gasprobenmischung bestimmt werden. Außerdem kann eine Temperatursonde (nicht gezeigt) in der erfindungsgemäßen Vorrichtung vorgesehen sein, wie beispielsweise in der in Fig. 3 dargestellten und als Gasanalyseinrichtung ausgebildeten gegenwärtig bevorzugten Ausführungsform.

Obwohl andere Arten des Vergleichs bei den CCS-Daten angewandt werden können, werden gegenwärtig drei bevorzugte Vergleichstechniken benutzt, die nachfolgend beschrieben sind:

Erstens kann man die Spitzenwerte der CCS-Daten mit den CCS-Spitzenwerten der Datenbank vergleichen, um die Konzentration der detektierten Substanz, z. B. des detektierten Gases, zu bestimmen. So können z. B., wie unter Bezugnahme auf Fig. 5c erläutert sei, die CCS-Spitzenwerte bei 82, 84, 90, 92, 98 und 100 mit den CCS-Spitzenwerten in der gespeicherten Datenbank verglichen werden. Die Konzentration der detektierten Substanz, z. B. des detektierten Gases, wird im wesentlichen dadurch bestimmt, daß man die gemessenen CCS-Spitzenwerte mit den Datenbank-CCS-Spitzenwerten der gleichen Substanz, wie z. B. des gleichen Gases, vergleicht, die jeweils eine bekannte Konzentration repräsentieren bzw. daß man die gemessenen CCS-Spitzenwerte mit dem Datenbank-CCS-Spitzenwert der gleichen Substanz, beispielsweise des gleichen Gases, bei einer bekannten Konzentration "aufeinanderpaßt".

Die in Fig. 5a bei 58 bis 60 sowie bei 68 bis 69 veranschaulichte Grundlinienverschiebung führt in Fig. 5c zu kleinen Spitzen bei 108 bzw. 110. Da die kleinen Spitzen 108 und 110 kein Teil eines Musters bzw. typischen Verlaufs sind, der sich ergibt, wenn eine Probengasmischung entweder in die Kammer eingeleitet oder aus der Kammer abgeführt wird, läßt man diese kleinen Spitzen 108, 110 beim Bestimmen der Konzentration des Gases außer Betracht. Eine Verfahrensweise, diese Art von kleinen Spitzen aus den CCS-Daten zu eliminieren, welche zum Vergleich zur Bestimmung der Gaskonzentration herangezogen werden, besteht darin, die Datenerfassungs- und Mikroprozessoreinheit 46 so zu programmieren, daß sie nur CCS-Daten in Betracht zieht, die in einem Muster vorliegen, welches ein Einleiten einer Probengasmischung in die Kammer anzeigt, d. h., welches aus einer negativen Spitze, gefolgt von einer positiven Spitze besteht. Außerdem kann ein vorbestimmter minimaler Absolutspitzenwert von dem Benutzer derart gewählt werden, daß irgendwelche Spitzenwerte der CCS-Daten, die geringer als der vorbestimmte minimale Absolutwert sind, bei dem Vergleich der CCS-Daten nicht benutzt werden. Dadurch wird ausgeschaltet, daß irgendwelche Daten- die durch elektrisches Rauschen erzeugt worden sind, zum Vergleich verwendet werden.

Zweitens kann man die Summation oder Summe der Absolutwerte der CCS-Daten, die unter Verwendung des

erfindungsgemäßen Verfahrens und der erfindungsgemäßen Einrichtung, insbesondere gemäß den gegenwärtig bevorzugten Ausführungsformen, aktuell erzeugt worden sind, mit der Summation oder Summe des absoluten Werts von jedem der CCS-Werte in der bereits existierenden CCS-Datenbank verglichen. Z.B. kann dieser Vergleich in der Weise stattfinden, daß das Programm erst in Aktion tritt, wenn das Gas in die Probengaskammer 28 eingeleitet und dann aus der Probengaskammer 28 abgeführt wird. So ist es in Fig. 5c so, daß das Einleiten des Gases in die Probengaskammer bei 82, 84 dargestellt ist, während das Abführen des Gases aus der Probengaskammer bei 86, 88 dargestellt ist. Das Programm summiert dann die Absolutwerte der CCS-Daten zwischen 82 und 84 einschließlich dieser Punkte und vergleicht diese Summation bzw. Summe mit jenen CCS-Daten der bereits existierenden Datenbank und findet die Gaskonzentration, die im wesentlichen den gleichen CCS-Datenwert hat.

Drittens kann man auch die Summation oder Summe von jedem der CCS-Werte, multipliziert mit dem entsprechenden Zeitintervall, mit jener der bereits existierenden CCS-Datenbank für die detektierte Substanz, beispielsweise das detektierte Gas, bei einer Vielzahl von Substanz- bzw. Gaskonzentrationen und in einem Bereich von Temperaturen vergleichen. Die Substanz bzw. Gaskonzentration ist der Summation bzw. Summe von jedem CCS-Wert, der mit dem entsprechenden Zeitintervall multipliziert ist, proportional.

Jede der vorstehend erläuterten drei Techniken läßt sich leicht durch ein Mikroprozessorprogramm verwirklichen.

Da das CCS-Verfahren für schnelle Änderungen des Ausgangssignals empfindlich ist, könnten langsame Änderungen in der Konzentration undetektiert bleiben. Um dieses zu vermeiden, kann das erfindungsgemäße Verfahren, insbesondere die gegenwärtig bevorzugte Ausführungsform, in einer der drei folgenden Arten angepaßt bzw. auch für langsame Änderungen empfindlich gemacht werden:

Die eine Technik besteht darin, das durch die Probe geschickte Licht, in der vorliegend bevorzugten Ausführungsform das Licht in der Probenkammer 28, dadurch zu unterbrechen, daß die Lichtquelle 34 wiederholt ein- und ausgeschaltet wird, wobei das Licht, in der vorliegend bevorzugten Ausführungsform jenes innerhalb der Probengaskammer 28, sowohl dann detektiert wird, wenn es durch die Probe hindurchgeht, also vorliegend in der Probenkammer 28 vorhanden ist, als auch dann, wenn es nicht durch die Probe hindurchgeht, also vorliegend nicht in der Probengaskammer 28 vorhanden ist. Durch dieses wiederholte Ein- und Ausschalten der Lichtquelle 34 während des Detektierens des Lichts das durch die Probe geht, also vorliegend des Lichts in der Probenkammer 28, können langsame Änderungen unter Verwendung des Verfahrens und der Einrichtung nach der vorliegenden Erfindung leichter in dem Ausgangssignal erkannt und detektiert werden. Die Lichtdetektion erfolgt also sowohl dann, wenn die Lichtquelle 34 eingeschaltet und Licht in der Probenkammer 28 vorhanden ist, als auch dann, wenn die Lichtquelle 34 ausgeschaltet und kein Licht in der Probenkammer 28 vorhanden ist. Wenn nämlich die Lichtdetektion bei ausgeschalteter Lichtquelle stattfindet, ist das Ausgangssignal Null, so daß es für jeden CCS-Datenwert, welcher der Lichtdetektion entspricht, wenn das Licht in der Probenkammer 28 vorhanden ist, einen Null-Bezugswert erzeugt.

Eine andere Technik, durch die die Empfindlichkeit des erfindungsgemäßen Verfahrens und der Einrichtung nach der Erfindung, insbesondere in ihrer gegenwärtig bevorzugten Ausführungsform, gegenüber langsamen Änderungen in der Konzentration erhöht wird, besteht darin, mit einem zweiten Probenaufnehmer, der ein Bezugsprobenaufnehmer ist und eine bekannte Substanz mit einer bekannten Konzentration enthält, z. B. mit einer zweiten Kammer, die eine Bezugskammer ist und ein bekanntes Gas mit einer bekannten Konzentration enthält, abzuwechseln, beispielsweise denselben bzw. dieselbe abwechselnd in den Weg des Lichts zu bringen oder mit Licht zu durchstrahlen, derart, daß der Detektor 36 alternativ bzw. abwechselnd das durch den Probenaufnehmer für die aktuelle Probe und das durch den Bezugsprobenaufnehmer hindurchgegangene Licht detektiert, beispielsweise das Licht innerhalb der Probenkammer 28 und das Licht innerhalb der zweiten Kammer oder Bezugskammer, die das Bezugsgas enthält, detektiert. Z.B. könnte im Falle von Gasen als Proben die zweite Kammer oder Bezugskammer reine Luft enthalten. Ein optisches Bandpaßfilter kann dann vorgesehen sein, welches verhindert, daß irgendwelches Licht, das eine Wellenlänge in den Absorptionsspektren der in Luft vorhandenen Gase hat, zu dem Detektor hindurchgeht. Demgemäß wird jedesmal, wenn das Licht in der zweiten Kammer oder Bezugskammer detektiert wird, das Ausgangssignal zu Null, so daß ein Null-Bezugswert zwischen jedem Ausgangssignal, das dem in der Probenkammer 28 detektierten Licht entspricht, erzeugt wird.

Eine noch andere Technik, die bei dem Verfahren und der Einrichtung nach der Erfindung, insbesondere in ihrer gegenwärtig bevorzugten Ausführungsform, angewandt werden kann, um sie empfindlicher für langsame Änderungen in der Substanzkonzentration, insbesondere in der Gaskonzentration, zu machen, besteht darin, eine Datenbank vorzusehen, welche CCS-Daten enthält, die unter Verwendung der erfindungsgemäßen Analysiereinrichtung, insbesondere der Gasanalyisereinrichtung nach der Erfindung, mit einer bekannten Substanz bei einer bekannten Konzentration und in einem bekannten Temperaturbereich in der Probenkammer erzeugt worden sind, wie beispielsweise mit einem bekannten Gas, in einer bekannten Konzentration und in einem bekannten Temperaturbereich in der Probenkammer. Z.B. kann im Falle eines Gases die Temperaturansprech- bzw. -eichkurve für reine Luft in einem bekannten Temperaturbereich, wie sie beispielsweise in Fig. 1 gezeigt ist, verwendet werden. Durch abwechselndes graphisches Darstellen der unter Verwendung des erfindungsgemäßen Verfahrens und der Einrichtung nach der Erfindung erhaltenen CCS-Daten und der bereits existierenden CCS-Daten aus der Ansprech- bzw. Eichkurve von reiner Luft, beispielsweise der in Fig. 1 gezeigten Art, können langsame Änderungen in der Konzentration leichter identifiziert werden.

Wie oben im einzelnen beschrieben worden ist, ermöglichen es das Verfahren und die Einrichtung nach der Erfindung, nachteilige Wirkungen von Umgebungstemperaturänderungen, wie sie bei konventionellen Gasanalysatoren auftreten, auszuschalten. Obwohl das nicht näher erläutert worden ist, können mit dem Verfahren und der Einrichtung nach der Erfindung die nachteiligen Wirkungen von Temperaturänderungen ausgeschaltet werden, die durch irgendwelche Mittel oder Umstände verursacht werden.

Obwohl das gegenwärtig bevorzugte Verfahren und die gegenwärtig bevorzugte Einrichtung nach der Erfindung in Verbindung mit der Bestimmung der Konzentration von Methan erläutert worden sind, versteht es sich, daß dieses Verfahren und diese Einrichtung nach der Erfindung auch für die Bestimmung der Konzentration von anderen Gasen verwendet werden können, wie beispielsweise von Kohlendioxid, Kohlenmonoxid, Stickstoffdioxid und jedem anderen Gas, das ein Infrarotabsorptionsspektrum hat. Außerdem sind, obwohl das Verfahren und die Einrichtung nach der Erfindung anhand der Figuren der Zeichnung weitgehend unter Bezugnahme auf Gasproben erläutert wurden, das erfindungsgemäße Verfahren und die erfindungsgemäße Einrichtung nicht nur auf gasförmige Substanzen, sondern auch auf Chemikalien oder Substanzen im fluiden, insbesondere flüssigen, Zustand sowie im festen Zustand anwendbar, sofern die Chemikalien oder Substanzen ein Infrarotabsorptionsspektrum bzw. ein Infrarotabsorptionsfingerabdruckspektrum haben.

Die Erfindung betrifft ein Verfahren und eine Einrichtung zum Bestimmen der Konzentration einer Substanz, wie eines Festkörpers, eines Fluids, einer Flüssigkeit oder eines Gases, unter Verwendung von nichtdispersiver Infrarotabsorption. Das Verfahren umfaßt das Messen des Ausgangssignals für eine Mehrzahl von augenblicklichen Zeitdauern; das Berechnen der Änderung (CS) des Ausgangssignals; das Berechnen der Änderung der Änderung (CCS) des Ausgangssignals, wodurch ein Muster von CCS-Daten erzeugt wird; und das Vergleichen der CCS-Daten mit entsprechenden CCS-Daten für eine bekannte Bezugssubstanz, wie einen bekannten Festkörper, ein bekanntes Fluid, eine bekannte Flüssigkeit oder ein bekanntes Gas, bei einer bekannten Konzentration und in einem Bereich von bekannten Temperaturen. Die Einrichtung zum Bestimmen der Konzentration an einer bekannten Substanz in einer Proben Substanz, beispielsweise eines bekannten Gases in einer Probengas Mischung, umfaßt einen Probensubstanzaufnahme, beispielsweise eine Probenkammer; eine Lichtquelle; einen Detektor; einen Signalumwandler; und eine Datenerfassungs- und Mikroprozessoreinheit, welche das Ausgangssignal mißt bzw. erfaßt und einen Speicher mit einem Programm zur Berechnung der Änderung (CS) des Signals und der Änderung der Änderung (CCS) des Signals hat, und welche die von der Probensubstanz, beispielsweise von der Gasprobenmischung, erzeugten CCS-Daten mit CCS-Daten von bekannten Probensubstanzen, beispielsweise von bekannten Gasen, mit bekannten Konzentrationen und in bekannten Temperaturbereichen vergleicht.

Patentansprüche

1. Verfahren zum Bestimmen der Konzentration einer Substanz bekannter Art, die in einer Substanzprobe, insbesondere einer Substanzprobenmischung, vorhanden ist, beispielsweise der Konzentration eines Gases bekannter Art, das in einer Gasprobenmischung vorhanden ist, umfassend:

- (a) Vorsehen von Licht durch einen Probenaufnehmer, vorzugsweise eine Kammer (28);
- (b) Einführen der Substanzprobe in den Probenaufnehmer, beispielsweise der Gasprobenmischung in die Kammer (28);
- (c) Detektieren von Licht, das durch die Substanzprobe hindurchgegangen ist, beispielsweise von Licht in der Kammer (28), und Erzeugen eines elektrischen Ausgangssignals, das eine Funktion der Menge des detektierten Lichts ist;
- (d) Messen des Ausgangssignals für drei aufeinanderfolgende augenblickliche Zeitdauern t_1 , t_2 , t_3 ;
- (e) Bestimmen der relativen Differenz zwischen den Ausgangssignalen bzw. dem Ausgangssignal bei t_1 und dem Ausgangssignal bei t_2 , welches eine Änderung CS_1 des Ausgangssignalwerts ergibt;
- (f) Bestimmen der relativen Differenz zwischen dem Ausgangssignal bei t_2 und dem Ausgangssignal bei t_3 , welches eine Änderung CS_2 des Ausgangssignalwerts ergibt;
- (g) Bestimmen der relativen Differenz zwischen der Änderung CS_1 des Ausgangssignalwerts und der Änderung CS_2 des Ausgangssignalwerts, welches eine Änderung der Änderung CCS_1 des Ausgangssignalwerts ergibt;
- (h) Wiederholen der Verfahrensschritte (d) bis (g), um eine Mehrzahl von CCS-Daten zu entwickeln, welche ein Muster bzw. einen Kurvenverlauf erzeugen; und
- (i) Vergleichen der CCS-Daten des Schritts (h) mit entsprechenden CCS-Daten für die Substanz bekannter Art, beispielsweise das Gas bekannter Art, in einem Bereich von bekannten Konzentrationen und in einem Bereich von bekannten Temperaturen, um die Konzentration der Substanz bekannter Art, beispielsweise die Konzentration des Gases bekannter Art, in der Probe, insbesondere Probenmischung, zu bestimmen, die in dem Probenaufnehmer, beispielsweise der Kammer (28), enthalten ist.

2. Verfahren zum Bestimmen der Konzentration einer Substanz bekannter Art, die in einer Substanzprobe, insbesondere einer Substanzprobenmischung, vorhanden ist, beispielsweise der Konzentration eines Gases bekannter Art, das in einer Gasprobenmischung vorhanden ist, umfassend:

- (a) Vorsehen von Licht durch einen Probenaufnehmer, vorzugsweise eine Kammer (28);
- (b) Einführen der Substanzprobe, beispielsweise einer Gasprobenmischung, in den Probenaufnehmer, vorzugsweise die Kammer (28);
- (c) Detektieren von Licht, das durch die Substanzprobe hindurchgegangen ist, vorzugsweise von Licht in der Kammer (28), und Erzeugen eines elektrischen Ausgangssignals, welches eine Funktion der Menge des detektierten Lichts ist;
- (d) Messen des Ausgangssignals für vier aufeinanderfolgende augenblickliche Zeitdauern t_1 , t_2 , t_3 , t_4 ;
- (e) Bestimmen der relativen Differenz zwischen den Ausgangssignalen bzw. dem Ausgangssignal bei t_1 und dem Ausgangssignal bei t_2 , welches eine Änderung CS_1 des Ausgangssignalwerts ergibt;
- (f) Bestimmen der relativen Differenz zwischen dem Ausgangssignal bei t_3 und dem Ausgangssignal bei t_4 , welches eine Änderung CS_2 des Ausgangssignalwerts ergibt;
- (g) Bestimmen der relativen Differenz zwischen der Änderung CS_1 des Ausgangssignalwerts und der Änderung CS_2 des Ausgangssignalwerts, welches eine Änderung der Änderung CCS_1 des Ausgangssi-

gnalwerts ergibt;

(h) Wiederholen der Verfahrensschritte (d) bis (g), so daß eine Mehrzahl von CCS-Daten entwickelt wird, welche ein Muster bzw. einen Kurvenverlauf erzeugt; und

(i) Vergleichen der CCS-Daten des Schritts (h) mit entsprechenden CCS-Daten für die Substanz bekannter Art, beispielsweise das Gas bekannter Art, in einem Bereich von bekannten Konzentrationen und in einem Bereich von bekannten Temperaturen, um die Konzentration der Substanz bekannter Art, beispielsweise des Gases bekannter Art, in der Probe, insbesondere Probenmischung, zu bestimmen, die in dem Probenaufnehmer, vorzugsweise in der Kammer (28), enthalten ist.

3. Verfahren zum Bestimmen der Konzentration einer Substanz bekannter Art in einer Substanzprobe, insbesondere einer Substanzprobenmischung, beispielsweise eines Gases bekannter Art in einer Gasprobenmischung, umfassend:

(a) Vorsehen von Licht durch einen Probenaufnehmer, vorzugsweise eine Kammer (28);

(b) Einführen der Substanzprobe, beispielsweise der Gasprobenmischung, in den Substanzaufnehmer, vorzugsweise in die Kammer (28);

(c) Detektieren von Licht, das durch die Substanzprobe hindurchgegangen ist, vorzugsweise Detektieren von Licht in der Kammer (28), und Erzeugen eines elektrischen Ausgangssignals, das eine Funktion der Menge des detektierten Lichts ist;

(d) Messen des Ausgangssignals während einer ersten augenblicklichen Zeitdauer t_1 ;

(e) Messen des Ausgangssignals während einer zweiten, folgenden augenblicklichen Zeitdauer t_2 ;

(f) Messen des Ausgangssignals während einer dritten, folgenden augenblicklichen Zeitdauer t_3 ;

(g) Subtrahieren des Ausgangssignals bei t_2 von dem Ausgangssignal bei t_1 , welches eine Änderung CS_1 des Signalwerts ergibt;

(h) Subtrahieren des Ausgangssignals bei t_3 von dem Ausgangssignal bei t_2 , welches eine Änderung CS_2 des Signalwerts ergibt;

(i) Subtrahieren des Werts CS_2 von dem Wert CS_1 , welches die Änderung der Änderung CCS_1 des Signalwerts ergibt;

(j) Wiederholen der Verfahrensschritte (d) bis (i), so daß eine Mehrzahl von CCS-Daten entwickelt wird, die ein Muster bzw. einen Kurvenverlauf erzeugen; und

(k) Vergleichen der CCS-Daten vom Schritt (j) mit entsprechenden CCS-Daten für die Substanz bekannter Art, beispielsweise das Gas bekannter Art, in einem Bereich von bekannten Konzentrationen und in einem Bereich von bekannten Temperaturen, um die Konzentration der Substanz bekannter Art, beispielsweise des Gases bekannter Art, in der Probe, insbesondere Probenmischung, zu bestimmen, die in dem Probenaufnehmer, vorzugsweise der Kammer (28), enthalten ist.

4. Verfahren nach Anspruch 1, 2, oder 3, dadurch gekennzeichnet, daß die Wellenlänge des Lichts eine Wellenlänge in dem Absorptionsspektrum der Substanz bekannter Art, beispielsweise des Gases bekannter Art, ist.

5. Verfahren nach Anspruch 1, 2 oder 3, dadurch gekennzeichnet, daß der Schritt des Vorsehens von Licht weiter das wiederholte Ein- und Ausschalten der Lichtquelle (34) umfaßt, derart, daß der Schritt des Detektierens von Licht sowohl dann stattfindet, wenn das Licht in dem Probenaufnehmer, vorzugsweise in der Kammer (28), vorhanden ist, als auch dann, wenn das Licht in dem Probenaufnehmer, vorzugsweise in der Kammer (28), nicht vorhanden ist.

6. Verfahren nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 5, dadurch gekennzeichnet, daß das Verfahren weiter die Verfahrensschritte des Vorsehens eines zweiten, bevorzugt abgeschlossenen, Probenaufnehmers, vorzugsweise einer zweiten, bevorzugt abgeschlossenen, Kammer, umfaßt, der bzw. die eine bekannte Bezugssubstanz, beispielsweise ein bekanntes Bezugsgas, von einer bekannten Konzentration enthält, derart, daß der Detektionsschritt das alternative bzw. abwechselnde Detektieren der Menge des Lichts, das durch die Probensubstanz hindurchgegangen ist, vorzugsweise des Lichts in der Probenkammer (28), und des Detektierens der Menge des Lichts, das durch die Bezugssubstanz hindurchgegangen ist, vorzugsweise der Menge des Lichts in der zweiten, bevorzugt abgeschlossenen Kammer, umfaßt.

7. Verfahren nach Anspruch 6, dadurch gekennzeichnet, daß der Verfahrensschritt des Vorsehens von Licht das Positionieren bzw. Führen des Lichts derart umfaßt, daß es alternativ bzw. abwechselnd durch die Bezugssubstanz und die Probensubstanz gerichtet wird, beispielsweise, daß es abwechselnd bzw. alternativ durch die zweite, bevorzugt abgeschlossene, Kammer, welche ein bekanntes Bezugsgas enthält, und dann durch die Kammer (28), welche eine Gasprobenmischung enthält, gerichtet wird.

8. Verfahren nach einem oder mehreren der Ansprüche 1 bis 6, dadurch gekennzeichnet, daß der Verfahrensschritt des Vorsehens von Licht das Vorsehen eines kontinuierlichen Lichtstroms von der Lichtquelle (34) durch die Probensubstanz, vorzugsweise durch die Kammer (28), welche beispielsweise die Gasprobenmischung enthält, umfaßt.

9. Verfahren nach einem oder mehreren der vorhergehenden Ansprüche, dadurch gekennzeichnet, daß der Schritt des Vergleichens der CCS-Daten das Erzeugen oder Benutzen einer Datenbank umfaßt, die CCS-Daten für die Substanz bekannter Art, beispielsweise ein Gas bekannter Art, in einem Bereich von bekannten Konzentrationen und in einem Bereich von bekannten Temperaturen enthält, und das alternative bzw. abwechselnde Zugreifen auf die CCS-Daten von der Datenbank und die aktuell erzeugten CCS-Daten, insbesondere die im Schritt (g) und/oder (h) des Anspruchs 1 oder des Anspruchs 2 oder im Schritt (i) und/oder (j) des Anspruchs 3 erzeugten CCS-Daten.

10. Verfahren nach einem oder mehreren der vorhergehenden Ansprüche, dadurch gekennzeichnet, daß der Verfahrensschritt des Vergleichens der CCS-Daten das Vergleichen jedes Spitzenwerts der aktuell erzeugten CCS-Daten, insbesondere der im Schritt (g) und/oder (h) des Anspruchs 1 oder des Anspruchs 2 oder im

Schritt (i) und/oder (j) des Anspruchs 3 erzeugten CCS-Daten, mit einem Spitzenwert der CCS-Daten der bekannten Substanz, beispielsweise des bekannten Gases, bei bekannten Konzentrationen und in einem bekannten Bereich von Temperaturen umfaßt.

11. Verfahren nach einem oder mehreren der vorhergehenden Ansprüche, dadurch gekennzeichnet, daß der Schritt des Vergleichens der CCS-Daten das Vergleichen einer Summation oder Summe von allen Absolutwerten der aktuell erzeugten CCS-Daten, insbesondere der im Schritt (g) und/oder (h) des Anspruchs 1 oder des Anspruchs 2 oder im Schritt (i) und/oder (j) des Anspruchs 3 erzeugten CCS-Daten, mit einer Summation bzw. Summe von allen Absolutwerten der CCS-Daten der bekannten Substanz, beispielsweise des bekannten Gases, bei bekannten Konzentrationen und in einem bekannten Bereich von Temperaturen umfaßt.

12. Verfahren nach einem oder mehreren der vorhergehenden Ansprüche, dadurch gekennzeichnet, daß der Verfahrensschritt des Vergleichens der CCS-Daten das Vergleichen einer Summation bzw. Summe von jedem aktuell erzeugten CCS-Datenwert, insbesondere von jedem im Schritt (g) und/oder (h) des Anspruchs 1 oder des Anspruchs 2 oder im Schritt (i) und/oder (j) des Anspruchs 3 erzeugten CCS-Datenwert, multipliziert mit seinem entsprechenden Zeitintervall, mit einer Summation bzw. Summe der CCS-Daten der bekannten Substanz, beispielsweise des bekannten Gases, von einer bekannten Konzentration in einem bekannten Bereich von Temperaturen, multipliziert mit seinem entsprechenden Zeitintervall, umfaßt.

13. Verfahren nach einem oder mehreren der vorhergehenden Ansprüche, dadurch gekennzeichnet, daß der Schritt des Vergleichens der CCS-Daten weiter das Eliminieren irgendwelcher CCS-Daten umfaßt, die einen Absolutwert haben, der kleiner als ein vorbestimmter minimaler CCS-Spitzenwert ist.

14. Einrichtung zum Bestimmen der Konzentration einer Substanz bekannter Art, die in einer Substanzprobe, insbesondere einer Substanzprobenmischung, vorhanden ist, beispielsweise der Konzentration eines Gases bekannter Art, das in einer Gasprobenmischung vorhanden ist, umfassend:

(a) einen Probenaufnehmer, vorzugsweise eine Probenkammer (28), die beispielsweise eine Fluid- bzw. Gaskammer ist, welche einen Einlaß (30) und einen Auslaß (32) hat;

(b) eine Infrarotlichtquelle (34), die mit einer Stromquelle verbindbar und so angebracht ist, daß sie die Substanzprobe durchstrahlt, wobei vorzugsweise die Infrarotlichtquelle (34) innerhalb der Probenkammer (28), beispielsweise einer Fluid- bzw. Gaskammer, vorgesehen oder angebracht ist;

(c) einen Detektor (36), der so positioniert ist, daß er das durch die Probensubstanz hindurchgegangene Licht detektiert und das detektierte Licht in ein elektrisches Ausgangssignal umwandelt, welches eine Funktion des detektierten Lichts, insbesondere der Menge des detektierten Lichts, ist, wobei der Detektor (36) vorzugsweise in der Probenkammer (28), beispielsweise der Fluid- bzw. Gaskammer, zum Detektieren des Lichts in der Kammer (28) positioniert ist;

(d) ein optisches Bandpaßfilter (40), das auch in dem Weg des Lichts, vorzugsweise innerhalb der Kammer (28), positioniert ist;

(e) einen mit dem Detektor (36), gegebenenfalls über einen Verstärker (42) oder dergleichen, verbindbaren Signalumsetzer (44), welcher das elektrische Ausgangssignal von einer Analogausgangsgröße in eine Digitalausgangsgröße transformiert bzw. umwandelt; und

(f) ein Datenerfassungs- und Mikroprozessormittel (46) oder eine Datenerfassungs- und Mikroprozessoreinrichtung (46), das bzw. die mit dem Signalumsetzer (44), gegebenenfalls über einen Verstärker oder dergleichen, verbunden ist und die folgenden Funktionen hat:

(i) Messen des Ausgangssignals für vier aufeinanderfolgende augenblickliche Zeitdauern t_1 , t_2 , t_3 , t_4 ;

(ii) Bestimmen der relativen Differenz zwischen den Ausgangssignalen bzw. dem Ausgangssignal bei t_1 und dem Ausgangssignal bei t_2 , welches eine Änderung CS_1 des Ausgangssignalwerts ergibt;

(iii) Bestimmen der relativen Differenz zwischen dem Ausgangssignal bei t_3 und dem Ausgangssignal bei t_4 , welches eine Änderung CS_2 des Ausgangssignalwerts ergibt;

(iv) Bestimmen der relativen Differenz zwischen der Änderung CS_1 des Ausgangssignalwerts und der Änderung CS_2 des Ausgangssignalwerts, welches eine Änderung der Änderung CCS_1 des Ausgangssignalwerts ergibt;

(v) Wiederholen der Funktionen (i) bis (iv), so daß eine Mehrzahl von CCS-Daten entwickelt wird, welche ein Muster bzw. einen Kurvenverlauf erzeugen; und

(vi) Vergleichen der CCS-Daten der Funktion (v) mit entsprechenden CCS-Daten für die Substanz bekannter Art, beispielsweise das Gas bekannter Art, in einem Bereich von bekannten Konzentrationen und in einem Bereich von bekannten Temperaturen, um die Konzentration der Substanz bekannter Art, beispielsweise des Gases bekannter Art, in der Probenmischung zu bestimmen, die von dem Licht durchstrahlt worden ist, insbesondere der Probenmischung, die in der Kammer (28) enthalten ist.

15. Einrichtung nach Anspruch 14, dadurch gekennzeichnet, daß sie weiter einen zweiten, Bezugsprobenaufnehmer, insbesondere eine zweite, Bezugskammer, wie beispielsweise ein zweite, Bezugsgaskammer, umfaßt.

16. Einrichtung nach Anspruch 14 oder 15, dadurch gekennzeichnet, daß das Datenerfassungs- und Mikroprozessormittel (46) oder die Datenerfassungs- und Mikroprozessoreinrichtung (46) eine Datenbank hat, welche CCS-Daten von bekannten Substanzen, beispielsweise von bekannten Gasen, die bekannte Konzentrationen in einem oder mehreren bekannten Temperaturbereichen haben, enthält.

Hierzu 7 Seite(n) Zeichnungen

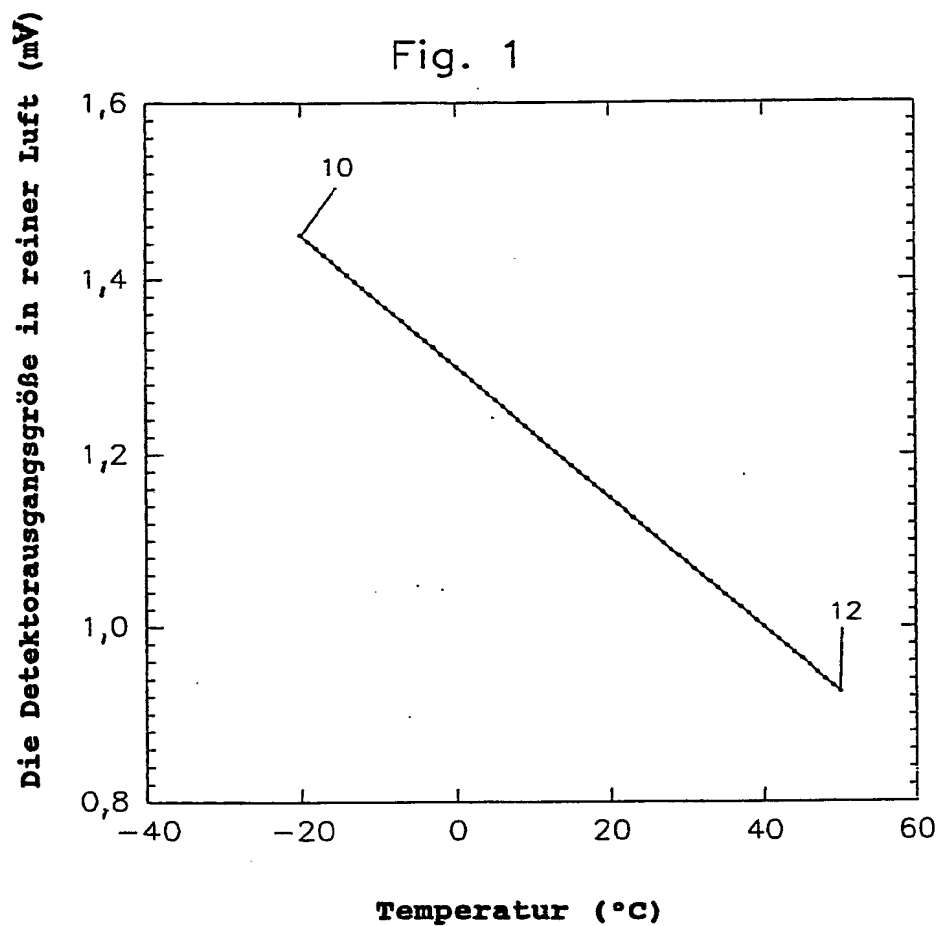


Fig. 2

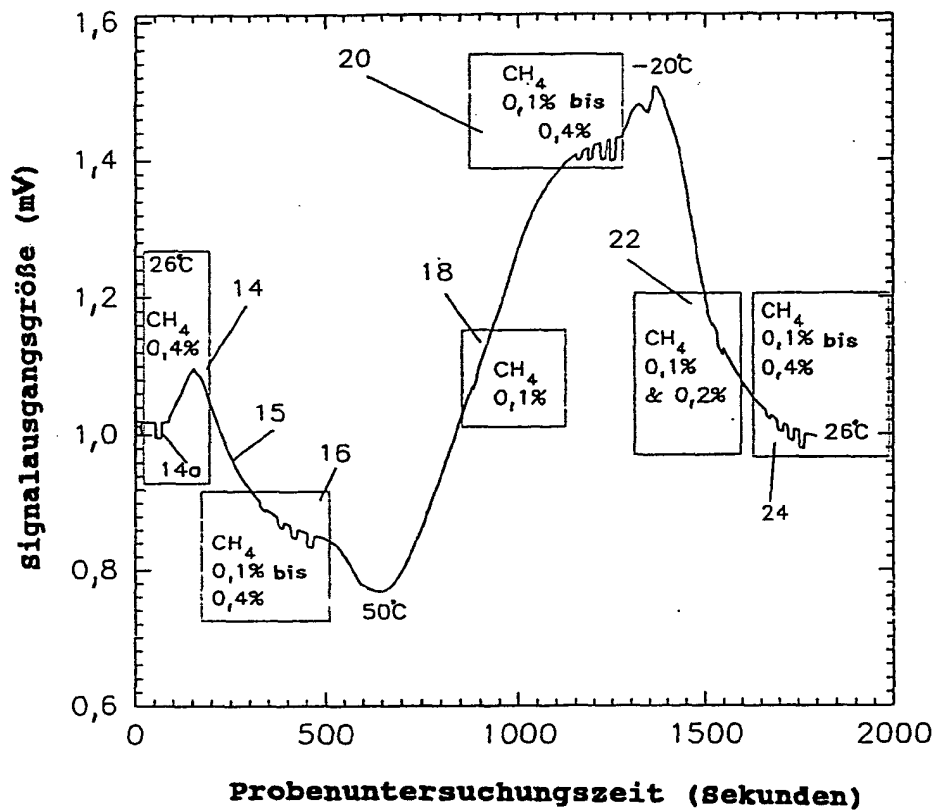


Fig. 3

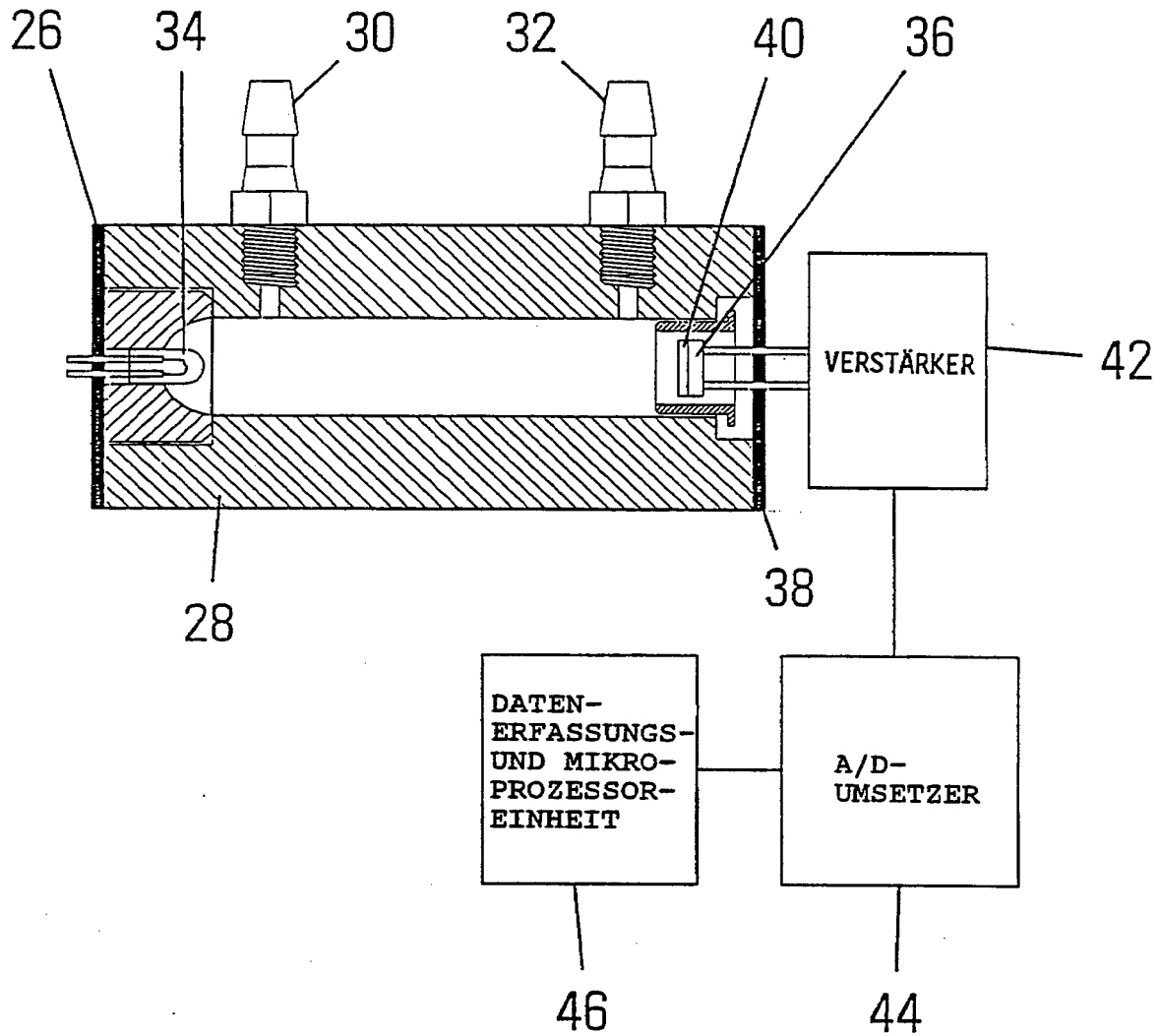


Fig. 4

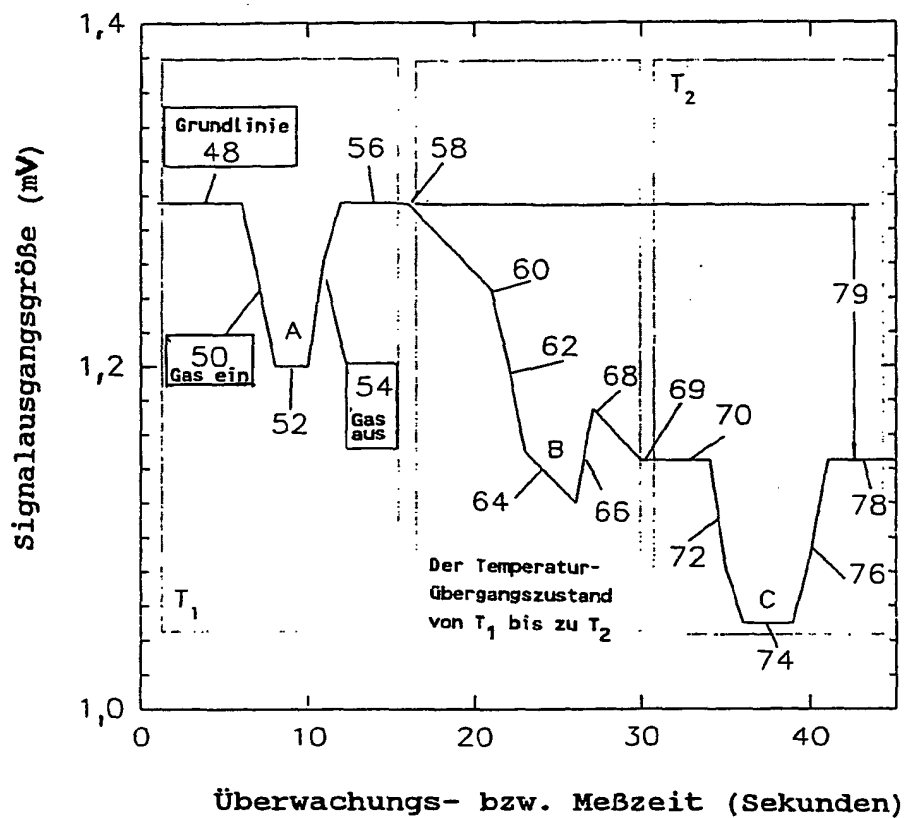


Fig. 5a

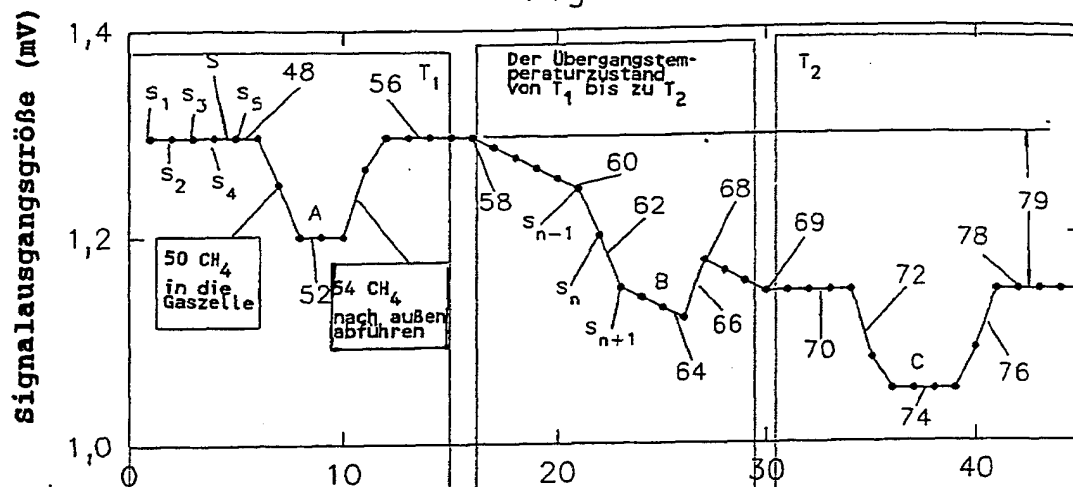


Fig. 5b

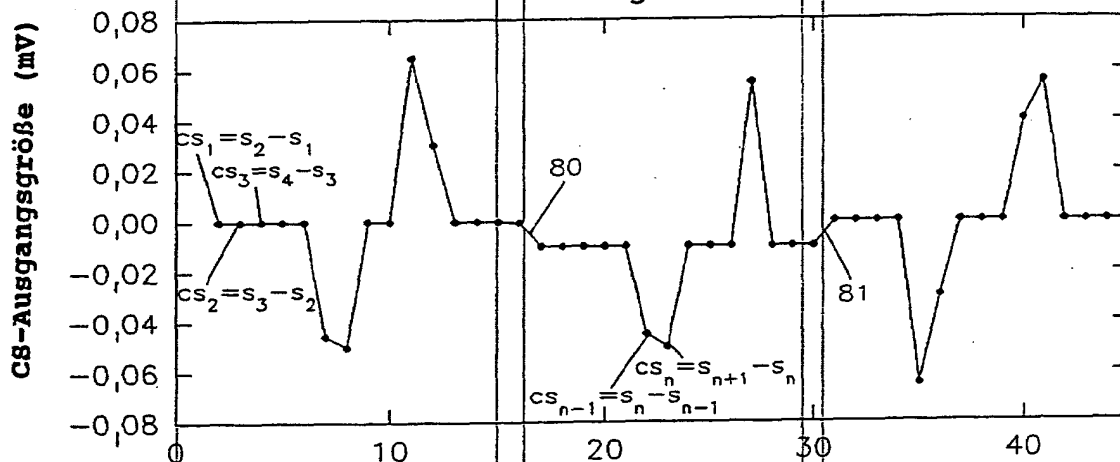
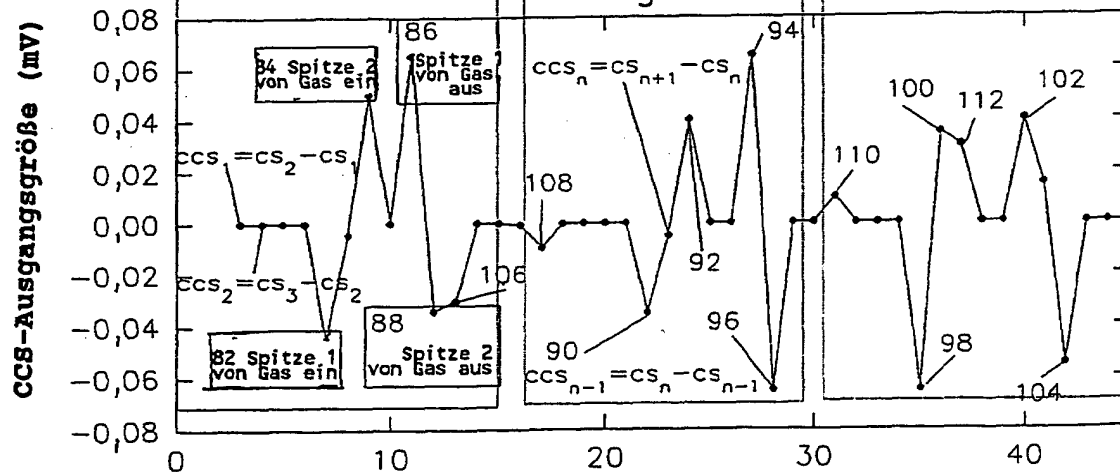


Fig. 5c



Überwachungs- bzw. Meßzeit (s kunden)

Fig. 6

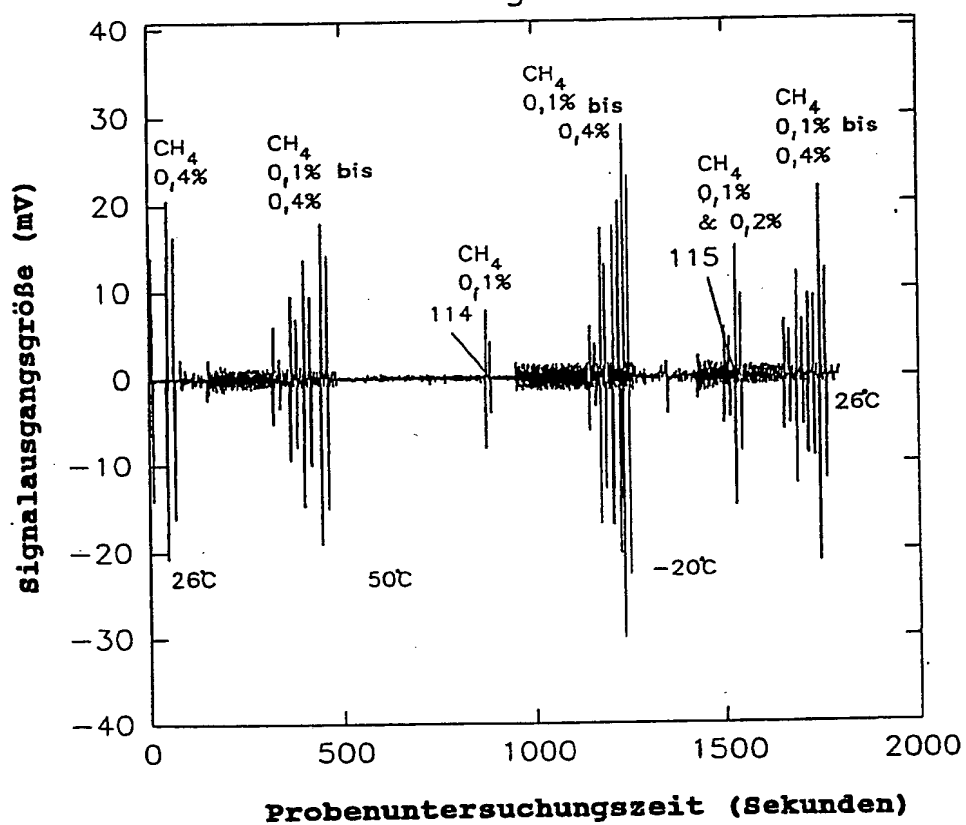


Fig. 7

